УДК 539.3

П.В. Трусов, П.С. Волегов

Пермский национальный исследовательский
политехнический университет, Пермь, Россия

ФИЗИЧЕСКИЕ ТЕОРИИ ПЛАСТИЧНОСТИ: ТЕОРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ К ОПИСАНИЮ НЕУПРУГОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ. Ч. 3: ТЕОРИИ УПРОЧНЕНИЯ, ГРАДИЕНТНЫЕ ТЕОРИИ

Приводится обзор широкого класса теорий пластичности, получивших название физических теорий пластичности (в иностранной литературе – crystal plasticity theories), в основе формулировок определяющих соотношений, гипотез и основных положений которых лежит рассмотрение в явной форме механизмов деформирования на мезо- и микромасштабах. Третья часть обзора посвящена вопросам, связанным с описанием упрочнения в моно- и поликристаллах в рамках существующих физических теорий пластичности. Упрочнение по системам скольжения кристаллитов играет чрезвычайно важную роль в физических теориях пластичности, в значительной мере определяет адекватность данного класса моделей. Рассматриваются также теории пластичности, в которых используются модели обобщенных континуумов (в том числе градиентные теории).

Ключевые слова: обзор, физические теории пластичности, упрочнение, дислокации, градиентные теории, структурно-аналитическая теория.

P.V. Trusov, P.S. Volegov

Perm State Technical University, Perm, Russia

CRYSTAL PLASTICITY THEORIES AND THEIR APPLICATIONS TO THE DESCRIPTION OF INELASTIC DEFORMATIONS OF MATERIALS. PART 3: HARDENING THEORIES, GRADIENT THEORIES

Provides an overview of a wide class of plasticity theories, known as crystal plasticity theories, based on the wording of constitutive relations, hypotheses and the main postulates of which lies in the consideration of explicit mechanisms of deformation at the meso- and microscale levels. The third part of the review is devoted to issues related to the mono- and polycrystals hardening description in existing crystal plasticity theories. Slip systems hardening in crystallites plays an extremely important role in crystal plasticity because largely determine the adequacy of this class of models. The models of generalized continua (including the gradient theory) are also considered.

Keywords: review, crystal plasticity theories, hardening, dislocations, gradient theory, structural-analytic theory.

5. Законы упрочнения в физических теориях пластичности

Изменение физико-механических свойств образца в процессах обработки металлов является следствием существенной перестройки микро- и мезоструктуры материала [10]. Описывать такие процессы невозможно без изучения и создания соответствующих моделей, в явном виде учитывающих физические первопричины эволюции микроструктуры материала при больших деформациях. Непосредственно в структуру физических теорий пластичности описание эволюции микроструктуры вводят через специфические соотношения (как правило, мезо- или микроуровня), определяющие изменение критических сдвиговых напряжений на системах скольжения в зависимости от некоторого набора параметров (в качестве которых могут выступать сдвиги, температура, энергия дефекта упаковки и т.д.). Известно, что даже незначительное изменение значений, входящих в закон упрочнения материальных параметров, может качественно отразиться на результатах описания поведения материала, в определяющие соотношения которого входят эти законы упрочнения, что говорит о необходимости очень тонкого и корректного учета механизмов неупругого деформирования материала, наиболее важных для исследования того или иного процесса.

В большинстве работ в рамках математических теорий пластичности, посвященных исследованию упрочнения, классификацию моделей последнего проводят исходя из качественного анализа вида кривой напряжение–деформация (получаемой в макроопытах) при продолжающемся активном нагружении и рассмотрения экспериментальных данных, полученных при исследовании микроструктуры материала при той или иной интенсивности деформаций [7, 9 и др.]. Так, в упрочнении часто выделяют стадии, наступающие последовательно при пластической деформации образца. Это стадия легкого скольжения, имеющая место непосредственно после достижения предела текучести материал; стадия линейного упрочнения, связанная, по-видимому, с пересечением дислокационных линий и формированием дислокационных структур; стадия параболического упрочнения, наблюдаемая у материалов с низкой энергией дефекта упаковки (ЭДУ) и связанная с взаимодействием уже не отдельных дислокаций, а образовавшихся на ранних стадиях дислокационных субструктур, а также с образованием и разрушением сидячих дислокаций [11]. Подобное рассмотрение, как представляется, едва ли можно использовать при построении физически обоснованной теории пластичности, так как, по сути, такая классификация представляет собой попытку описать упрочнение, основываясь только на макрофеноменологическом подходе, не раскрывая при этом физических первопричин упрочнения и не опираясь на физику взаимодействия носителей механизмов пластической деформации – дислокаций и дислокационных субструктур.

Значительное внимание в физических теориях (как упругопластических, так и вязкопластических) уделяется модификации законов упрочнения в связи с новыми экспериментальными данными, полученными с применением высокоразрешающей аппаратуры (в особенности электронных микроскопов).

Краткий обзор существующих теорий упрочнения приведен в работе [58]; особое внимание уделяется теориям, основанным на рассмотрении эволюции дислокационных субструктур. Выделена модель [65, 66], в которой зерно представляется совокупностью блоков ячеек; для описания блоков вводятся ориентации потенциально возможных границ и присущие границам плотности дислокаций. Следуя указанным статьям, предлагаются эволюционные уравнения для плотности дислокаций, «налипающих» на границах блоков ячеек. Критические напряжения сдвига определяются по объемной доле границ блоков в зерне и накопленной плотности дислокаций. Входящие в эволюционные уравнения и выражения критического напряжения параметры модели предлагается определять методом наименьших квадратов по экспериментальным данным; приведены соответствующая постановка задачи оптимизации и алгоритм ее решения. Предлагаемый закон упрочнения был использован в самосогласованной вязкопластической модели для анализа деформирования при сложном нагружении поликристаллической меди (ГЦК-решетка). Сложное нагружение осуществлено по следующей схеме: образцы из отожженной меди прокатывались за один проход на 5,6, 10,5 и 18,8%, затем из них вырезались цилиндрические образцы в направлении прокатки, поперечном направлении и в направлении нормали к плоскости прокатанного листа. В дальнейшем полученные образцы подвергались осадке до деформаций от 24 до 44%. Для случая прокатки на 5,6 и 10,5% и последующей осадки предлагаемая модель показывает хорошее соответствие с экспериментальными данными; несколько худшее соответствие результатов имеет место при деформировании на первом этапе (прокатки) до 18,8%, в связи с чем авторы отмечают необходимость доработки модели упрочнения для описания IV стадии.

В большинстве современных исследований по упрочнению авторы используют так называемые дислокационно ориентированные модели (*dislocation based models*), в которых в качестве внутренних переменных микроуровня вводят скалярные плотности дислокаций на системах скольжения; далее записывают эволюционные уравнения для плотности дислокаций, а в качестве замыкающих уравнений записывают выражение, связывающее скорости сдвигов со скоростями изменения плотности дислокаций (обычно используется соотношение Орована) [25, 30–33, 60, 72]. В качестве примера можно привести работу [32], в которой развивается именно такой подход. В части, касающейся описания упрочнения, авторы придерживаются классического подхода, когда скорость изменения критических касательных напряжений на системе скольжения записывается в виде

$$\dot{\tau}_c^g = \sum_{h=1}^{N_{slip}} H^{gh} \dot{\gamma}^h, \tag{1}$$

где τ_c^g – критическое напряжение сдвига на системе скольжения g, точка сверху означает материальную производную по времени, $\dot{\gamma}^h$ – скорость сдвига по системе скольжения h, N_{slip} – количество активных систем скольжения, а коэффициенты (модули) упрочнения H^{gh} описывают взаимодействие дислокаций различных систем скольжения. Принимается гипотеза о том, что плотность дислокаций определяется тремя процессами: возникновения, скольжения и аннигиляции дислокаций при достижении достаточно большой плотности и продолжающейся пластической деформации. Эти механизмы учитываются в соотношении

$$\dot{\rho}^g = \frac{1}{b}\left(\frac{1}{L^g} - 2 y_c \rho^g\right)\dot{\gamma}^g, \tag{2}$$

где ρ^g – плотность дислокаций в g-й системе, b – модуль вектора Бюргерса, y_c – расстояние аннигиляции для дислокационного диполя, L^g – длина свободного пробега дислокаций, определяемая, в свою очередь, соотношением

$$L^g = \frac{g_0}{\sqrt{\sum_{h=1, h\neq g} \rho^h}}, \tag{3}$$

где g_0 – параметр, определяемый дислокационной структурой. Авторы [30] используют в качестве закона упрочнения соотношение

$$\tau_c^g = \tau_0 + \alpha\mu b \sqrt{\sum_{h=1}^{N_{slip}} a^{gh} \rho^h}, \tag{4}$$

где τ_0 – начальное критическое напряжение сдвига, α – параметр, связанный со стабильностью дислокационной структуры, μ – модуль сдвига. Модули упрочнения H^{gh} тогда связаны с коэффициентами взаимодействия систем скольжения a^{gh} соотношением

$$H^{gh} = \frac{\alpha\mu}{2\sqrt{\sum_{h=1}^{N_{slip}} a^{gh} \rho^h}} a^{gh} \left(\frac{1}{L^g} - 2 y_c \rho^g \right). \tag{5}$$

Попытка явного учета различных конкретных механизмов взаимодействия дислокаций в законе упрочнения делается в работе [72]. К существенным недостаткам предлагаемой модели следует отнести тот факт, что модули упрочнения в работе есть величины постоянные, а способ их определения не описан. Перечислим некоторые учитываемые в работе механизмы: формирование барьеров Ломера–Коттрелла, образование барьеров Хирта и так называемых «скользящих стыков», взаимодействие дислокаций на скрещивающихся системах скольжения, взаимодействие дислокаций, лежащих в одной плоскости, взаимодействие дислокаций одной и той же системы. Для скалярной плотности дислокаций принимаются соотношения вида (2) без учета размера зерна.

Следует отметить, что применение в качестве внутренних переменных скалярных плотностей дислокаций на системах скольжения влечет за собой большие сложности при использовании модели. Во-первых, использование переменных микроуровня сразу лишает исследователя возможности оперировать сколь-нибудь достоверными экспериментальными данными, дающими представление о реальных процессах, протекающих на данном масштабном уровне при пластической деформации; во-вторых, даже опираясь на геометрическую теорию дислокаций, едва ли можно учесть в уравнениях вида (2) взаимодействие дислокаций различных систем скольжения; наконец, в-третьих, даже в упомянутой достаточно простой модели введено множество материальных констант микроуровня, определять значения которых возможно только из экспериментов. В силу того, что состояние современной экспериментальной базы не позволяет в динамике отслеживать эволюцию дислокационных субструктур в объеме деформируемого материала, дислокационно ориентированный подход к описанию упрочнения представляется интересным и перспективным, но еще недостаточно инструментально оснащенным.

Заслуживает внимания также работа [15], в которой рассматривается трехмерная дислокационно ориентированная модель пластической деформации чистого алюминия. В ней для определения скоростей пластических сдвигов по системам скольжения вначале записывают модифицированное уравнение Орована как для винтовых, так и для краевых дислокаций; представляется странным учет движения винтовых дислокаций в уравнении Орована, хотя бы в силу особенностей движения винтовых дислокаций по сравнению с краевыми, в частности отсутствия систем скольжения для них как таковых. Для скалярной плотности дислокаций принимается гипотеза аддитивности скоростей генерации и аннигиляции дислокаций, скорости генерации как краевых, так и винтовых дислокаций принимаются не зависящими от направления скольжения.

Значения параметров упрочнения в соответствии с [72] разбиваются на несколько групп, исходя из типа взаимодействия дислокаций тех или иных пар систем скольжения (например, выделяют взаимодействия дислокаций разных систем, имеющих один и тот же вектор Бюргерса; систем с одной плоскостью скольжения; систем, склонных к образованию различных барьеров: Ломера–Коттрелла, Хирта, некоторых других).

В работе [51] рассматривается вязкопластическая модель, учитывающая влияние температуры, основанная на континуальной модели «механического порогового напряжения» (MTS – mechanical threshold stress), предложенной Фоллансби и Куксом [27]. Определяющие соотношения, используемые в данной модели, рассмотрены подробно во второй части обзора, здесь остановимся на особенностях описания упрочнения.

Критическое напряжение сдвига $\tau_c^{(k)}$ в рамках модели для учета влияния скорости деформации и температуры масштабируется «механическим порогом» $\hat{\tau}$, представляющим собой сопротивление сдвигу при 0 K; последний разделен на атермическую $\hat{\tau}_a$ и термическую $\hat{\tau}_t^l$ составляющие, так что

$$\hat{\tau} = \hat{\tau}_a + \sum_l \hat{\tau}_t^l . \tag{6}$$

Следует отметить, что использование термина «термическая составляющая» (введенного в исходной статье [27]) для второго члена правой части (6)) представляется не совсем корректным, поскольку «пороговое напряжение» $\hat{\tau}$ определено как сопротивление сдвигу при нулевой абсолютной температуре, а первый член правой части по определению не зависит от температуры θ.

Отмечается, что составляющая $\hat{\tau}_a$ характеризует нечувствительное к скорости взаимодействие дислокаций с дальнодействующими барьерами (например, границами зерен), а $\hat{\tau}_t^l$ – чувствительные к скорости деформации взаимодействия дислокаций с близкодействующими препятствиями (например, дислокациями леса, примесными атомами), которые могут быть преодолены за счет термической активации. При изменяющихся температурах и скоростях деформации соответствующий вклад в критическое напряжение сдвига τ_t^l связан с его исходным аналогом $\hat{\tau}_t^l$ масштабирующей функцией $S_t^l(D_e, \theta)$, так что $\tau_t^l = \hat{\tau}_t^l S_t^l(D_e, \theta)$.

Критическое напряжение сдвига для всех СС определяется аналогично «механическому порогу»:

$$\frac{\tau_c}{G} = \frac{\hat{\tau}_a}{G} + \sum_l \frac{\tau_t^l}{G} = \frac{\hat{\tau}_a}{G} + \sum_l S_t^l(D_e, \theta)\frac{\tau_t^l}{G_0}. \tag{7}$$

Здесь G_0 – некоторое отсчетное значение модуля сдвига G, определяемого соотношением

$$G = \tilde{G}(\theta) = G_0 - \frac{D_0}{\exp\left(\theta_0 / \theta\right) - 1}, \tag{8}$$

D_0, θ_0 – экспериментально определяемые константы.

Для описания кинетики взаимодействия на короткодействующих препятствиях используется соотношение Аррениуса и феноменологическое выражение для свободной энергии как функции напряжений, тогда каждая компонента τ_t^l может быть записана в виде

$$\frac{\tau_{\mathrm{t}}^l}{\mathrm{G}} = S_t^l(\mathrm{d}_u, \theta)\frac{\hat{\tau}_t}{\mathrm{G}_0} = \left[1 - \left(\frac{\kappa\theta}{\mathrm{g}_0\mathrm{Gb}^3}\ln\frac{\mathrm{d}_{u0}}{\mathrm{d}_u}\right)^{1/q}\right]^{1/p}\frac{\hat{\tau}_t}{\mathrm{G}_0}. \tag{9}$$

Здесь κ – константа Больцмана, b – модуль вектора Бюргерса, g_0 – нормализованная энергия активации дислокаций для преодоления препятствий, d_{u0} – константа, p, q – константы, характеризующие форму препятствий ($0 \le p \le 1,\ \ 1 \le q \le 2$).

В стандартной MTS-модели используются два термических члена, обозначаемые как $\hat{\tau}_t^l = \hat{\tau}_i$, $\hat{\tau}_t^2 = \hat{\tau}_\varepsilon$, тогда соотношение (7) перепишется в виде

$$\frac{\tau_{\mathrm{c}}}{\mathrm{G}} = \frac{\hat{\tau}_{\mathrm{a}}}{\mathrm{G}} + S_i(\mathrm{d}_u, \theta)\frac{\hat{\tau}_i}{\mathrm{G}_0} + S_\varepsilon(\mathrm{d}_u, \theta)\frac{\hat{\tau}_\varepsilon}{\mathrm{G}_0}, \tag{10}$$

где

$$\begin{gathered} S_i(\mathrm{d}_u, \theta) = \left[1 - \left(\frac{\kappa\theta}{g_{0i}\mathrm{G}b^3}\ln\frac{\mathrm{d}_{u0i}\mathrm{D}}{\mathrm{d}_u}\right)^{1/q_i}\right]^{1/p_i}, \\ S_\varepsilon(\mathrm{D}_{\mathrm{e}}, \theta) = \left[1 - \left(\frac{\kappa\theta}{g_{0\varepsilon}\mathrm{G}b^3}\ln\frac{\mathrm{D}_{\mathrm{e}0\varepsilon}}{\mathrm{D}_{\mathrm{e}}}\right)^{1/q_\varepsilon}\right]^{1/p_\varepsilon}. \end{gathered} \tag{11}$$

В этих соотношениях $\hat{\tau}_i$ описывает термическую составляющую сопротивления деформации (в цитируемой работе этот член не учитывается), а $\hat{\tau}_\varepsilon$ – взаимодействие подвижных дислокаций с лесом дислокаций (учитывается).

Эволюционное уравнение для $\hat{\tau}_\varepsilon$ в скоростях записывается в следующей форме:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\tau}_\varepsilon}{\mathrm{d}t} = h(\theta, \mathrm{d}_u, \hat{\tau}_\varepsilon)\sum_{k=1}^{K}\left|\dot{\gamma}^{(k)}\right| = \left(h_0 - h_r(\theta, \mathrm{d}_u, \hat{\tau}_\varepsilon)\right)\sum_{k=1}^{K}\left|\dot{\gamma}^{(k)}\right|, \tag{12}$$

где h_0 отражает упрочнение, обусловленное накоплением дислокаций (принимается постоянным), а h_r описывает скорость динамического возврата. Наиболее употребимыми функциональными формами скорости упрочнения h являются запись через гиперболический тангенс (Фоллансби–Кукс) или в виде степенного закона (Кукс и др.):

$$h = h_0\left(1-\frac{\tanh\left[\alpha\hat{\tau}_{\mathrm{e}}^{(k)}\Big/\hat{\tau}_{\varepsilon s}\right]}{\tanh(\alpha)}\right),\qquad \frac{h}{\mathrm{G}}=\frac{h_0}{\mathrm{G}_0}\left(1-\frac{\hat{\tau}_{\mathrm{e}}^{(k)}}{\hat{\tau}_{\varepsilon s}}\right)^{\kappa},\tag{13}$$

где α, κ – эмпирические константы, $\hat{\tau}_{\varepsilon s}$ – пороговое напряжение насыщения. В обоих соотношениях h_0 описывает начальную скорость упрочнения; скорость упрочнения h с ростом деформации уменьшается и стремится к насыщению. Применение подобных моделей для деформаций, превосходящих единицу, исключено, так что невозможно описать IV стадию упрочнения.

Пороговое напряжение насыщения $\hat{\tau}_{\varepsilon s}$ является функцией скорости деформации и температуры:

$$\ln\frac{\mathrm{d}_u}{\mathrm{d}_{u0\varepsilon}}=\frac{g_{0\varepsilon s}\mathrm{G}b^3}{\kappa\theta}\ln\frac{\hat{\tau}_{\varepsilon s}}{\hat{\tau}_{\varepsilon s0}},$$

где $\mathrm{d}_{u0\varepsilon}$, $g_{0\varepsilon s}$, $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ – эмпирические константы.

Верификация предлагаемой модели осуществлена сопоставлением полученных с ее помощью результатов расчета напряжений с результатами стандартной изотропной модели MTS. Скоростная и температурная зависимости определялись в опытах на сжатие алюминиевого сплава Al 5182 при температурах 200 и 300 °С при скоростях деформации 0,001 и 1,0 с$^{-1}$. Показано очень хорошее соответствие результатов. Анализ предсказания моделью формирования текстуры осуществлен сопоставлением с результатами, полученными Kalidindi e.a. с использованием модели Тейлора; отмечается хорошее качественное соответствие результатов.

В статье [69] детально анализируются законы кинематического внутризеренного упрочнения (или – законы, определяющие эволюцию остаточных микронапряжений $\boldsymbol{\rho}$). Каждое зерно представляется совокупностью внутренностей и стенок ячеек, материал внутри ячейки полагается упругопластическим, стенки рассматриваются состоящими из упругого материала. Для получения аналитического решения рассматривается простая геометрия ячеек (сферическая и круговая цилиндрическая). Определение остаточных микронапряжений осуществлено с помощью моделей Kröner и Berveiller & Zaoui в предположении изотропии кристаллов. Согласно модели Kröner тензор остаточных микронапряжений $\boldsymbol{\rho}_k$ в k-й ячейке определяется как

$$\boldsymbol{\rho}_k = -2\mathrm{G}(1-\beta)(\boldsymbol{\varepsilon}_k^p - \boldsymbol{\varepsilon}^p),$$

где β – геометрический фактор (для сферического включения решение Эшелби дает $\beta = 2(4–5\nu)/15(1–\nu)$, ν – коэффициент Пуассона), $\boldsymbol{\varepsilon}_k^p$ – пластическая составляющая тензора деформаций внутри k-й ячейки, $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ – средняя по кристаллу пластическая деформация. Berveiller & Zaoui предложили уточненное соотношение

$$\boldsymbol{\rho}_k = -2\mathrm{G}(1-\beta)\frac{1}{1+{}^3\!/_2\,\mathrm{G}\,\dfrac{\varepsilon_u^p}{\sigma_u}}(\boldsymbol{\varepsilon}_k^p - \boldsymbol{\varepsilon}^p),$$

где $\varepsilon_u^p, \sigma_u$ – интенсивности пластических деформаций и напряжений. С учетом предположения о деформировании стенок ячеек упругим образом последнее соотношение модифицировано к виду

$$\boldsymbol{\rho}_k = -\frac{f_w}{1-f_w}\mathrm{G}(1-\beta)\frac{1}{1+{}^3\!/_2\,\mathrm{G}\,\dfrac{\varepsilon_u^p}{\sigma_u}}\sum_{i=1}^{N}\gamma_i(\mathbf{n}_i\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_i\mathbf{n}_i),$$

где f_w – объемная доля границ ячеек. Результаты расчетов сопоставлялись с данными экспериментальных исследований разных авторов, проведенных на растяжение и циклическое нагружение монокристаллов, показано удовлетворительное соответствие экспериментальных и теоретических результатов, полученных с помощью модифицированной модели. Результаты расчетов по модели Kröner на один-два порядка превышают экспериментально измеренные.

Интересный вариант физической модели упруговязкопластичности предложен в работе [52], согласно которому монокристалл представляется совокупностью «жестких» (зоны с повышенной плотностью дислокаций, например, стенки ячеек) и «мягких» (зоны с пониженной плотностью дислокаций, например, внутренность ячеек) областей.

Принимается гипотеза Фойгта; напряжения определяются суммой напряжений в «жестких» и «мягких» областях. В каждой из областей для упругой составляющей тензора деформаций используется изотропный закон Гука с отличающимися константами Ламе. Принимается гипотеза об аддитивном разложении тензора малых деформаций на упругую и вязкопластическую составляющие. Неупругие деформации осуществляются сдвигом в активных системах скольжения, условием активации является выполнение закона Шмида. Для каждой из областей скорости сдвигов в k-й СС определяются степенным законом вида

$$\dot{\gamma}^{(k)}_{(S)} = \tau^{(k)}_{(S)} \left(\frac{\tau^{(k)}_{(S)}}{\tau_{c0}} \right)^{\mathrm{n}} \operatorname{sign}(\tau^{(k)}_{(S)}), \quad \dot{\gamma}^{(k)}_{(S)} = \left(\frac{\tau^{(k)}_{(H)}}{\tau^{(k)}_{c}} \right)^{n} \operatorname{sign}(\tau^{(k)}_{(H)}), \tag{14}$$

где индексы S, H относятся соответственно к «мягкой» (soft) и «жесткой» (hard) зонам, τ_{c0} – постоянное критическое напряжение в «мягкой» области, $\tau^{(k)}_{c}$ – критическое напряжение сдвига в «жесткой» области, $\tau^{(k)}_{(S)}$, $\tau^{(k)}_{(\mathrm{H})}$ – сдвиговые напряжения в k-й СС, n – показатель скоростной чувствительности. Для критического напряжения сдвига в «жесткой» области $\tau^{(k)}_{c}$ предлагается эволюционное уравнение, учитывающее активное и латентное упрочнение за счет сдвигов в обеих областях и возможное разупрочнение за счет сдвигов в «мягкой» зоне.

Предложенная модель была использована для анализа поведения монокристаллов при непропорциональном циклическом нагружении (траектории деформирования – круговые, в виде квадрата, 8-лучевой звезды), отмечается удовлетворительное качественное соответствие экспериментальным данным.

Модификация упруговязкопластической модели, учитывающая наряду со сдвиговой модой деформирование двойникованием, предложена в [46]. Для скоростей сдвигов и скорости изменения объемной доли двойников использован степенной закон с одинаковым показателем степени; для двойникования предполагается наличие предельной доли двойников, запрещен обратный переход. Градиент скорости перемещений для зерна определяется как сумма трех составляющих: скоростей сдвига в исходной матрице, скорости двойникования и скорости сдвига в сдвойникованной области, взвешенных с объемными долями каждой зоны. Для упрощения процедуры интегрирования соотношения записываются в неизменной отсчетной конфигурации.

Приведены примеры расчета текстуры для ГЦК- и ОЦК-поликристаллов; из сопоставления с экспериментальными данными следует, что неучет двойникования ведет к качественно неверным результатам. В [47] описанная модель расширена включением еще одной моды деформирования – микрополос сдвига. Применение данной модели к ГЦК-поликристаллам с низкой энергией дефекта упаковки позволило описать четыре стадии кривой упрочнения; отмечается необходимость учета образования микрополос сдвига для корректного предсказания эволюции текстуры.

Детальному описанию законов упрочнения ГЦК-кристаллов посвящена статья [45]. Рассмотрение кинематического и изотропного упрочнения монокристаллов основано на тщательном физическом анализе взаимодействия дислокаций различных СС. Использовано гипоупругое соотношение, в котором коротационная производная тензора напряжений определяется по тензору спина решетки. Спин решетки полагается равным разности тензора вихря и антисимметричной части тензора скоростей сдвига по СС. Скорости сдвига в СС устанавливаются с помощью вязкопластического закона (произведение степенной и экспоненциальной функций сдвиговых напряжений).

Реализация модели осуществлена с применением МКЭ (пакет ABAQUS, 8-узловые симплекс-элементы); рассмотрен образец из монокристаллической меди, подверженный одноосному растяжению с постоянной скоростью роста напряжений. С позиций взаимодействия дислокаций тщательно описывается и анализируется упрочнение в первичной и вторичных СС. Сопоставление с экспериментальными результатами позволяет заключить, что предлагаемая модель хорошо описывает упрочнение на первых двух стадиях пластического деформирования.

В работе [20] рассматривается модель пластичности кристаллов, основанная на введении тензора плотности и/или скалярной плотности дислокаций. Во втором случае предлагается использовать вязкопластический закон: при выполнении условия Шмида на некоторой системе скольжения скорость сдвига в ней определяется соотношением

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \left\langle \frac{\left|\tau^{(k)} - \rho^{(k)}\right| - \tau_{\mathrm{c}}^{(k)}}{g^{(k)}} \right\rangle^{n^k} \operatorname{sign}(\tau^{(k)} - \tau_{\mathrm{c}}^{(k)}), \tag{15}$$

где $\tau^{(k)} = \mathbf{M}_S^{(k)} : \boldsymbol{\sigma}$ – сдвиговое напряжение в системе скольжения k, $\mathbf{M}_S^{(k)}$ – симметричный ориентационный тензор, $\tau_c^{(k)}, \rho^{(k)}$ – параметры изотропного и кинематического упрочнения, зависящие от плотности дислокаций; $g^{(k)}$, n^k – материальные константы, $\langle X \rangle = \mathrm{Max}\,(0, X)$. Подробно закон упрочнения рассмотрен в [23] и имеет вид

$$\tau_c^{(k)} = \tau_0^{(k)} + \sum_r Q^k h_{kr} \left(1 - e^{-b_r \gamma_{\mathrm{cum}}^{(r)}}\right), \gamma_{\mathrm{cum}}^{(r)} = \int_0^t \left|\dot{\gamma}^{(r)}\right| \mathrm{d}t\,, \tag{16}$$

$$\rho^{(k)} = c^k \alpha^k,\ \dot{\alpha}^k = \dot{\gamma}^{(k)} - \mathrm{d}^k \alpha^k \left|\dot{\gamma}^{(k)}\right| - \left(\frac{\left|\rho^{(k)}\right|}{N^k}\right)^{m^k} \mathrm{sign}\left(\alpha^k\right), \tag{17}$$

где матрица $\left[Q^k h_{kr}\right]$ определяет активное и латентное упрочнение (неизотропный закон упрочнения), b_r, d^k, m^k, N^k – материальные константы.

Отмечается, что в работах Флека и Хатчинсона, Фореста с соавторами данная модель расширена включением кривизн–кручений кристаллической решетки, связанных с формированием дислокационных субструктур; в законе упрочнения появляется добавочный член, пропорциональный кривизне плоскости скольжения. Отмечается существенное влияние модуля упрочнения за счет кривизны решетки на напряженно-деформированное состояние в окрестности кончика трещины в монокристалле. К сожалению, объяснений, почему кривизны–кручения должны приводить к дополнительному изотропному упрочнению, не приводится; как представляется, более важным является появление моментных напряжений и несимметрии тензора напряжений, которые в модели не рассматриваются.

Весьма подробно вопросы построения и применения физических моделей упруговязкопластичности для описания поведения поликристаллов в широком диапазоне скоростей деформации (10^{-3}–10^2 c^{-1}) при больших деформациях (порядка 100%) и относительно низких гомологических температурах (T_{Γ}<0,3) рассмотрены в статье [18]. Как и в большинстве рассмотренных выше работ, использовано мультипликативное разложение градиента места и ОС анизотропной гиперупругости (с учетом температурной деформации), в котором в качестве мер напряженного и деформированного состояния приняты соответственно второй тензор Пиола–Кирхгоффа и тензор деформаций Коши–Грина, определенные в терминах разгруженной конфигурации.

Пластическое деформирование полагается реализующимся скольжением краевых дислокаций; следует отметить, что, как и во многих других работах последнего десятилетнего периода, закон вязкопластичности выводится на основе уравнения Орована

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \rho_m^{(k)} b \overline{v}^{(k)}\left(\tau^{(k)}, \tau_c^{(k)}, \theta\right), \quad \cancel{\sum_k}\ , \tag{18}$$

где $\rho_m^{(k)}$ – плотность мобильных дислокаций, $\overline{v}^{(k)}$ – средняя скорость движения дислокаций в k-й СС, причем $\overline{v}^{(k)}$ равна нулю при $\left|\tau^{(k)}\right| < \tau_c^{(k)}$. Критическое напряжение сдвига полагается равным сумме двух составляющих: сопротивления близкодействующих барьеров, которые могут быть преодолены за счет термических флуктуаций даже при напряжениях ниже барьера Пайерлса–Набарро (называемого термической составляющей) $\tau_{ct}^{(k)}$ и сопротивления дальнодействующих барьеров (называемого атермической составляющей) $\tau_{\text{ca}}^{(k)}$ (см., например, [27]). Для модуля средней скорости движения дислокаций принимается соотношение

$$\left|\overline{v}^{(k)}\right| = \begin{cases} 0 & \Delta\tau^{(k)} \le 0, \\ \overline{l}^{(k)} \nu \exp\left(-\dfrac{\psi^{(k)}\left(\Delta\tau^{(k)}, \tau_{ct}^{(k)}\right)}{\kappa\,\theta}\right) & 0 < \Delta\tau^{(k)} < \tau_{ct}^{(k)}, \end{cases} \tag{19}$$

где $\Delta\tau^{(k)} = \left|\tau^{(k)}\right| - \tau_{\text{ca}}^{(k)}$, $\overline{l}^{(k)}$ – средняя длина свободного пробега дислокаций, ν – характеристический частотный параметр (порядка 10^{12} с^{-1}), $\psi^{(k)}$ – свободная энтальпия активации (или свободная энергия активации Гиббса); направление движения совпадает с направлением сдвиговых напряжений. Предлагается модификация закона упрочнения, рассмотренного выше [62], для учета влияния температуры и скорости деформации.

Для определения макронапряжений используется процедура осреднения Тейлора по представительному объему, включающему 400 зерен. Предлагаемая модель встроена в конечно-элементный пакет ABAQUS. Подробно описаны процедура и результаты идентификации модели, выполненной для чистого (99,987 %) алюминия и алюминиевого сплава (ГЦК-решетка). Для идентификации использованы известные в литературе экспериментальные данные по одноосному растяжению образцов при нескольких значениях постоянных скоростей деформаций и температур. Полученные параметры были далее применены для теоретического предсказания поведения материала при одноосном нагружении со скачками по скорости деформаций и температуре; режимы изменения скоростей деформаций и температур выбраны аналогичными реализуемым в известных из литературы экспериментах. Сравнение расчетных и экспериментальных данных по зависимостям напряжение–деформация показывает хорошее соответствие.

В работе [70] описана упруговязкопластическая модель, в которой наряду с дислокационной сдвиговой модой деформирования учитывается двойникование. Используется гипотеза аддитивности упругой, дислокационной сдвиговой и двойниковой составляющих тензора деформации скорости; для двойников сдвиг полагается постоянным, соответствующая составляющая деформации скорости определяется скоростью изменения объемной доли двойников. Модель применена к анализу деформирования образцов из стали аустенитного класса (ГЦК-решетка). Вкладом двойникования в повороты пренебрегается; скорость поворота решетки определяется разностью тензора вихря и антисимметричной части дислокационной скорости сдвига. Дислокационная скорость сдвига на k-й СС определяется соотношением

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{(k)}}{\mathrm{G}} \right)^2 \exp\left(-\frac{\Delta F}{\kappa\theta} \left(1 - \frac{\left|\tau^{(k)}\right|}{\tau_c^{(k)}} \right) \right) \operatorname{sign}\left(\tau^{(k)}\right),$$

где $\dot{\gamma}_0$ – материальный параметр, ΔF – энергия активации преодоления барьеров (в отсутствии напряжений), κ – постоянная Больцмана, θ – абсолютная температура.

Упрочнение по СС определяется плотностью дислокаций; приведено эволюционное уравнение для скорости изменения плотности дислокаций, которая пропорциональна скорости сдвига и уменьшается при увеличении длины свободного пробега дислокаций. Длина свободного пробега зависит от среднего диаметра зерна, расстояния между двойниками и плотности накопленных дислокаций. Средний размер пакета микродвойников полагается постоянной величиной (30 нм), число микродвойников в пакете в соответствии с экспериментальными данными принято равным 5. Кинетическое уравнение для объемной доли двойников записано в виде степенной зависимости от отношения напряжения сдвига по системе двойникования к критическому напряжению двойникования. Для связи параметров мезо- и макроуровней используется самосогласованная модель.

Предлагаемая модель использована для исследования поведения поликристаллического образца при одноосном растяжении; описана процедура идентификации модели. Результаты расчетов показывают, что вклад двойников в неупругую деформацию мал (около 3%); однако, являясь эффективными препятствиями для дислокаций, появление двойников ведет к значительному упрочнению. Двойникование имеет место в 90 % зерен представительного макрообъема, причем в большинстве зерен доминируют две системы двойникования. Объемная доля двойниковых пакетов растет с ростом деформации, составляя 6 % при деформации 0,3. Результаты расчета обнаруживают удовлетворительное соответствие экспериментальным данным.

В работе [57] приведено краткое описание эволюции микроструктуры при деформировании ГЦК-монокристаллов (ячейки, блоки ячеек, субзерна, дислокационные стенки, разделяющие ячейки и блоки). Для описания микроструктуры предлагается ввести внутренние переменные, моделирующие блоки ячеек и дислокационные стенки. В качестве основного ОС используется закон Гука, записанный для разгруженной конфигурации. Скорости сдвигов по СС определяются из закона Орована; скорость движения дислокаций устанавливается кинетическим законом, учитывающим энергию активации дислокаций, температуру, сдвиговые напряжения, плотности мобильных дислокаций и дислокаций леса. Основываясь на принципе максимума работы напряжений на пластических деформациях, стало возможным получить выражение для плотности мобильных дислокаций; представляется странным, что плотность мобильных дислокаций принимается пропорциональной корню квадратному плотности дислокаций леса. На основе того же принципа для случая «композита» из блоков ячеек и стенок выведено выражение для плотности мобильных дислокаций как функции плотностей дислокаций в блоках ячеек и дислокационных стенках. Предложены основанные на рассмотрении дислокационных реакций кинетические уравнения для изменения плотностей иммобильных дислокаций в блоках ячеек и в дислокационных стенках.

Для моделирования «композита» из блоков и стенок для каждой системы скольжения предлагается использовать модель Максвелла, в которой в силу сложности реализации пренебрегается упругими составляющими сдвигов. В итоге построенная модель имеет в своем составе десять материальных констант. Авторы отмечают, что вследствие построения всех кинетических уравнений на основе теории дислокаций указанные константы имеют ясно выраженный физический смысл и, по крайней мере, известен порядок этих величин. Авторами проведен физический анализ и обоснованы интервалы возможных значений каждой из констант, входящих в модель. Разработанная модель использована для анализа сжатия монокристалла алюминия при трех скоростях изменения приложенной нагрузки (0,2, 2 и 20 Н/с) и трех различных температурах (623, 673 и 723 К); сопоставление теоретических результатов с экспериментальными показывает удовлетворительное соответствие. Отмечается, что в дальнейшем модель предполагается расширить на более широкий температурный диапазон и ОЦК-кристаллы и встроить её в конечно-элементную программу.

Близкая к рассмотренной выше «композитная» упругопластическая модель для описания ячеистой структуры монокристалла рассмотрена в работе [77]. Материал представляется совокупностью ячеек и стенок (областей с повышенной плотностью дислокаций); записаны эволюционные уравнения для плотности дислокаций. Для моделирования используется теория течения с комбинированным законом упрочнения и гиперупругий закон, в котором второй тензор Пиола–Кирхгоффа определен в разгруженной конфигурации. На двухзвенных траекториях деформации (растяжение – растяжение с изломом траектории) анализируется влияние величины деформации первого участка траектории и угла излома на остаточные напряжения в ячейках и стенках; отмечается возможность применения модели для описания эффекта Баушингера. Результаты расчетов удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

В статье [67] рассмотрена самосогласованная «композитная» упруговязкопластическая модель, согласно которой зерно поликристалла представляется совокупностью «мягкого» ядра и «жесткой» оболочки. В ядре учитываются только статистически накопленные дислокации (СНД) (с нулевым суммарным вектором Бюргерса), тогда как в оболочке наряду со СНД важную роль играют геометрически необходимые дислокации (ГНД), обеспечивающие совместность деформаций по границам неоднородно деформируемых зерен. В каждой из двух зон тензор деформации скорости представляется суммой упругой и вязкопластической составляющих; для упругой составляющей используется изотропный закон Гука, для вязкопластической – степенной закон течения.

Напряжение течения определяется плотностью дислокаций; для плотностей СНД и ГНД приведены эволюционные уравнения. Для связи переменных мезо- и макроуровня использована самосогласованная схема (Эшелби), для упрощения анализа форма зерен считается сферической. Модель применена для исследования поведения стали ферритного класса с различными средними размерами зерна (5,5, 8,5, 15, 120 мкм). Модель хорошо описывает зависимость напряжения течения от размера зерна; показано, что в приграничной зоне внутренние напряжения существенно превышают напряжения в ядре зерен. Показано существенное влияние размера зерна на уровень остаточных напряжений второго рода (на мезоуровне). Все результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Модификация упруговязкопластической модели, основанная на прямом рассмотрении движения краевых и винтовых дислокаций, предложена в работе [15]. Скорость сдвига в каждой СС определяется плотностями соответствующих типов дислокаций и средними скоростями их движения (т.е. по уравнению Орована). Предложены эволюционные уравнения для плотности дислокаций, учитывающие их генерацию (источниками Франка–Рида) и аннигиляцию. Критические напряжения сдвига в СС определяются отдельно для краевых и винтовых дислокаций по плотности дислокаций обоих типов, накопленных в других СС, и законам взаимодействия с ними (с учетом образования барьеров дислокационного типа). Ротации решеток зерен устанавливаются ортогональным тензором, входящим в полярное разложение упругой составляющей градиента места. Подробно описана численная процедура реализации модели. Вышеописанная физическая модель была встроена в конечно-элементный пакет ABAQUS. Для идентификации использованы экспериментальные данные по растяжению монокристалла алюминия. Представлены результаты расчета прямых полюсных фигур при стесненной осадке (в условиях ПДС) образцов из поликристаллического алюминия.

В работах [11, 12, 14, 76] предлагается подход к описанию упрочнения в моно- и поликристаллах, связанный с физическим анализом механизмов взаимодействия дислокаций друг с другом и с границами зерен. Дается краткий обзор существующих в отечественной и иностранной литературе теорий упрочнения. Отмечается, что существуют два основных варианта построения таких соотношений: первый – без явного учета эволюции дефектной структуры материала, второй – на основе подхода к построению определяющих соотношений с использованием внутренних переменных, характеризующих микроструктуру материала; при этом, как правило, необходимо использовать переменные микроуровня – плотности дислокаций, что приводит к проблеме замыкания эволюционных уравнений.

Рассматриваются некоторые физические механизмы упрочнения, предлагается разделение упрочнения на неориентированное и ориентированное. Первое описывает упрочнение независимо от направления деформирования (образование пересечений дислокаций, жгутов, кос, барьеров Ломера–Коттрелла); такое упрочнение приводит к увеличению критического напряжения сдвига сразу на многих СС. Второе связано с накоплением упругой энергии на «поджатых дислокациях» (на различных барьерах), эта энергия может высвобождаться при «развороте» направления деформирования. Запасаемая на микродефектах энергия, в свою очередь, разделяется на два типа: не высвобождаемая на микро- и мезодеформациях и высвобождаемая; доля «высвобождаемости» зависит от сложности нагружения. Это разделение учитывается, например, при модификации основного (степенного) составляющего закона упрочнения и при описании эффекта Баушингера.

В предположении об аддитивности скоростей критических напряжений сдвига на системе скольжения, обусловленных различными механизмами упрочнения, основной закон упрочнения дополняется слагаемыми, учитывающими основные механизмы возникновения препятствий при пластическом деформировании, не учтенными первым (степенным) слагаемым.

Подход к описанию неориентированного упрочнения иллюстрируется на примере описания дополнительного упрочнения за счет образования барьеров Ломера–Коттрелла. Определяются внутренние переменные, дополнительная функция упрочнения $f_{\text{ЛК}}^{(i)}$ принимается в виде

$$f_{\text{ЛК}}^{(i)}\left(\gamma_{\text{ЭДУ}},\dot{\gamma}^{(i)},\gamma^{(j)}\right)=$$
$$=\xi_1\tau_c^{(i)}\left(1-\frac{\gamma_{\text{ЭДУ}}}{\gamma*_{\text{ЭДУ}}}\right)\text{H}\left(1-\frac{\gamma_{\text{ЭДУ}}}{\gamma*_{\text{ЭДУ}}}\right)\left(\int_0^t f_{\text{ЛК}}^{(i)}d\tau+f_0^{(i)}\right)^{-1}\dot{\gamma}^{(i)}\left(\sum_{j\neq i}^{N*}\gamma^{(j)}+\gamma_0^b\right),$$

где $\gamma_{\text{ЭДУ}}^*$ – критическое значение энергии дефекта упаковки (ЭДУ) материала, $\gamma_{\text{ЭДУ}}$ – ЭДУ материала, $N*$ – число СС, сопряженных к данной, $\tau_c^{(i)}$ – текущее критическое напряжение, γ_0^b – малая константа, ξ_1 – материальная константа, H – функция Хэвисайда.

Рассматривается ориентированное упрочнение за счет аннигиляции дислокаций, «поджатых» на препятствиях, при смене направления деформирования, а также за счет взаимодействия внутризеренных дислокаций с границами зерен в случае деформирования поликристалла. Подробно рассмотрены физика процесса аннигиляции и факторы, влияющие на уменьшение критического касательного напряжения на данной СС в результате аннигиляции дислокаций. Для учета высвобождаемой упругой энергии в соотношение для $f_{\text{ан}}^{(i)}$ введен дополнительный множитель, учитывающий сложность нагружения по всем СС:

$$f_{\text{ан}}^{(i)}\left(\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_m\right)=\frac{\mathrm{d}\tau_{\text{ан}}^{(i)}}{\mathrm{d}t}=-\xi_2\tau_{\text{ан}}^{(i)}\frac{\gamma^{(i)}}{\sum_j\gamma^{(j)}}\dot{\gamma}^{(i)}\left(\gamma^{(i+12)}+\gamma_0^a\right),\ \tau_{\text{ан}}^{(i)}\Big|_{t=0}$$
$$=\tau_{c0}^{(i)},\ i=\overline{1,24},$$

где $\sum_j\gamma^{(j)}$ – суммарный накопленный сдвиг, γ_0^a – малый параметр, ξ_2 – материальная константа.

При описании зернограничного упрочнения принимается модель прохождения дислокации через границу с образованием в ней дислокации ориентационного несоответствия. Дополнительное зернограничное упрочнение описывается при помощи соотношения

$$f_{\text{ЗГУ}}^{(i)}\left(\gamma^{(i)},\dot{\gamma}^{(i)},\xi\right)=\eta\gamma^{(i)}\dot{\gamma}^{(i)}\sum_{k=1}^{P}\frac{S_k}{V_0}\xi_{ik},$$

где S_k – площадь зерна, «приходящаяся» на данную СС, V_0 – объем зерна, P – количество плоских участков, аппроксимирующих границы зерна, мера разориентации ξ_{jk} определяется по минимальному значению для рассматриваемой СС данного зерна j, плоского участка границы k и всех СС l соседнего зерна: $\xi_{jk} = \min_{l=1,24}\left\{\mathbf{n}^{(k)}\left(\mathbf{b}^{(l)} - \mathbf{b}^{(j)}\right)\right\}$, где $\mathbf{n}^{(k)}$ – нормаль к плоскому участку границы.

Проведена серия численных экспериментов по деформированию моно- и поликристаллов с учетом различных дополнительных слагаемых в законе упрочнения. Удовлетворительно описано начало второй стадии упрочнения, связанное с введением в законы упрочнения слагаемого, описывающего дополнительное упрочнение за счет реакций на расщепленных дислокациях и образования барьеров Ломера–Коттрелла. Представлены результаты по реверсивному деформированию с учетом слагаемого, описывающего аннигиляцию дислокаций. Для модельного материала (чистая медь) показано, что при смене направления деформирования (с одноосного растяжения на одноосное сжатие в том же направлении) предел текучести материала снизился с ~33 МПа до ~30 МПа.

Проведены численные эксперименты по циклическому деформированию: представительный объем поликристалла подвергали кинематическому нагружению (растяжение-сжатие) при различном числе циклов нагружения. С увеличением количества циклов отчетливо проявляется эффект Баушингера, наблюдается явление «размывания» второй стадии упрочнения по всему участку пластического течения. Исследование изменения дефектной структуры материала при большом числе циклов показывает на постепенный выход всех СС на одинаковую плотность барьеров Ломера–Коттрелла. Приведена диаграмма одноосного сжатия поликристалла при учете слагаемого, описывающего зернограничное упрочнение. Заметен переход с некоторого момента деформирования от линейного упрочнения к нелинейному участку; нелинейность обусловлена совместным влиянием на скорость дополнительного упрочнения как скорости сдвига по данной СС, так и накопленного сдвига по этой же СС (в отличие от других дополнительных слагаемых).

6. Модели обобщенных континуумов

В последние годы для модификации различных физических теорий исследователями все чаще применяются модели обобщенных континуумов (градиентные теории – в особенности). Остановимся детальнее на некоторых работах данного направления. В статье [71], основанной на феноменологической градиентной теории пластичности [26], рассматривается вариант градиентной физической теории упруговязкопластичности. Анализируется случай малых градиентов перемещений, в связи с чем не делается различия между отсчетной и актуальной конфигурациями. В духе микроморфного континуума Миндлина [61] вводятся радиусы-векторы макроточки $\mathbf{X}$ и микроточки $\mathbf{x}$, соответствующие операторы Гамильтона обозначим как ∇ и $\square$. Каждой макроточке $\mathbf{X}$ приписывается микрообъем δV, наделенный микроструктурой (системами скольжения). Скорости сдвига по произвольной k-й СС определяются разложением в ряд Тейлора с сохранением градиентов первого порядка:

$$\dot{\gamma}^{(k)}(\mathbf{X},\mathbf{x}) = \left\langle \dot{\gamma}^{(k)} \right\rangle(\mathbf{X}) + \mathbf{x} \left\langle \square\dot{\gamma}^{(k)} \right\rangle(\mathbf{X}), \qquad (20)$$

где $\left\langle \dot{\gamma}^{(k)} \right\rangle(\mathbf{X})$ – осредненная по δV скорость сдвига по k-й СС, $\left\langle \square\dot{\gamma}^{(k)} \right\rangle(\mathbf{X})$ – осредненный по δV градиент скорости сдвига по k-й СС. Пластическая составляющая тензора деформации скорости далее определяется обычным соотношением

$$\mathbf{D}^{p} \equiv \mathbf{d}^{p} = \sum_{k} \dot{\gamma}^{(k)}(\mathbf{X},\mathbf{x})\,\mathbf{M}^{(k)}. \qquad (21)$$

Подстановка (20) в (21) и запись мощности напряжений в единице объема на скоростях пластических деформаций, $N^{p} = \frac{1}{\delta V}\int_{\delta V} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}^{p} \mathrm{d}V$, приводит к следующему результату:

$$N^{p} = \left\langle \boldsymbol{\sigma} \right\rangle : \left\langle \mathbf{d}^{p} \right\rangle + \left\langle \boldsymbol{\tau} \right\rangle \bullet \left\langle \boldsymbol{\eta}^{p} \right\rangle, \qquad (22)$$

где $\left\langle \mathbf{d}^{p} \right\rangle = \sum_{k} \left\langle \dot{\gamma}^{(k)} \right\rangle(\mathbf{X})\,\mathbf{M}^{(k)}$, $\left\langle \boldsymbol{\eta}^{p} \right\rangle = \sum_{k} \mathbf{M}^{(k)} \left\langle \square\dot{\gamma}^{(k)} \right\rangle(\mathbf{X})$, $\left\langle \boldsymbol{\sigma} \right\rangle = \frac{1}{\delta V}\int_{\delta V} \boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{d}V$, $\left\langle \boldsymbol{\tau} \right\rangle = \frac{1}{\delta V}\int_{\delta V} \boldsymbol{\sigma}\,\mathbf{x}\,\mathrm{d}V$, $\mathbf{A} \bullet \mathbf{B} = \mathrm{A}_{ijk}\mathrm{B}^{ijk}$; тензор (третьего ранга) $\left\langle \boldsymbol{\eta} \right\rangle$ называется тензором «парных напряжений».

Тензор скорости полных микродеформаций в δV полагается линейной функцией микрокоординат $\mathbf{x}$. Тогда мощность напряжений на единицу объема можно представить соотношением

$$N = \frac{1}{\delta V} \int\limits_{\delta V} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}\, \mathrm{d}V = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle : \langle \mathbf{D} \rangle + \langle \boldsymbol{\tau} \rangle \bullet \langle \boldsymbol{\eta} \rangle, \tag{23}$$

где $\langle \mathbf{D} \rangle = \frac{1}{\delta V} \int\limits_{\delta V} \mathbf{D}\, \mathrm{d}V$, $\langle \boldsymbol{\Delta} \rangle = \frac{1}{\delta V} \int\limits_{\delta V} \mathbf{D} \nabla\, \mathrm{d}V$. В дальнейшем полагается, что осредненный по δV тензор скорости микродеформаций $\langle \mathbf{D} \rangle$ равен тензору скорости макродеформаций Δ в точке **X,** Δ (**X**) = $\langle \mathbf{D} \rangle$, а $\mathbf{D}\nabla = \langle \boldsymbol{\Delta} \rangle$. Уравнения равновесия и статические граничные условия макроуровня получены на основе принципа виртуальной мощности. В качестве определяющих соотношений макроуровня использован закон Гука в скоростной форме как для напряжений, так и для парных напряжений:

$$\langle \dot{\boldsymbol{\sigma}} \rangle = \mathbf{C} : \mathbf{D}^{\mathrm{e}}, \quad \langle \dot{\boldsymbol{\tau}} \rangle = l_{\mathrm{e}}^2\, \mathbf{C} : \langle \dot{\boldsymbol{\Delta}}^{\mathrm{e}} \rangle, \tag{24}$$

где l_{e} – параметр, имеющий размерность длины и связанный с размером области δV («упругий масштаб»), **C** – обычный тензор упругих характеристик (4-го ранга).

На микроуровне используется модифицированная модель вязкопластичности. С этой целью вводятся эффективная скорость сдвига и эффективные сдвиговые напряжения для каждой СС, включающие в себя соответственно градиенты скоростей сдвигов и парные напряжения, с помощью масштабных коэффициентов приведенные к размерности скорости сдвига и обычного напряжения. Закон упрочнения по СС определяется в терминах эффективной скорости сдвига. Принимается степенной закон зависимости эффективной скорости сдвига от эффективного сдвигового напряжения на каждой СС. Модель замыкается гипотезой о равенстве отношений средних по СС скоростей сдвигов и их градиентов (последние умножаются на масштабные факторы) и соответствующих энергетически сопряженных силовых факторов на каждой СС, причем это отношение равно отношению эффективной скорости сдвига к эффективному напряжению сдвига в каждой СС. Приведены результаты решения модельной плоской задачи о деформировании бикристалла; анализируется влияние на результаты параметров модели (в частности, масштабных факторов).

В статье [24] градиентная модель основана на концепции «геометрически необходимых дислокаций (ГНД)» (восходящей к работам [17, 50, 64]; детальное рассмотрение теории ГНД, определение тензора их плотности через $\mathbf{F}^p$ и градиент $\mathbf{F}^p$ в отсчетной конфигурации содержится в [21]). Согласно этой концепции, наряду со «статистически накопленными дислокациями (СНД)» [17], являющимися следствием однородного пластического деформирования, вблизи областей неоднородности пластических сдвигов (например, в окрестности границ зерен) появляются дислокационные субструктуры типа стенок дислокаций, дислокационных ячеек и т.д., которые должны обеспечить совместность деформации решетки и отвечают за искривления – кручения решетки, которые и называются «геометрически необходимыми дислокациями».

В соответствие с указанной концепцией авторы представляют поликристалл совокупностью двух «фаз» – примерно однородно деформируемых «ядра» зерен и зон, моделирующих участки границы каждого из зерен.

В качестве основы для описания поведения «зон однородности» принята упруговязкопластическая модель [48], основанная на мультипликативном разложении Ли, изотропном гиперупругом законе, в котором в качестве мер напряженного и деформированного состояния выбраны соответственно второй тензор Пиола–Кирхгоффа и тензор деформаций Коши–Грина, определенные в терминах промежуточной (разгруженной) конфигурации.

Основное отличие от известных моделей кристаллов заключается в упомянутой выше «двухфазности» материала. Поликристалл представляется совокупностью «ядер» зерен и приграничных областей – бикристаллов. При этом бикристаллические зоны подразделяются на две подобласти – «внутреннюю» и «внешнюю» (для каждого зерна), каждая из этих подобластей «наследует» ориентацию систем скольжения зерен, примыкающих к моделируемому участку границы. На границе подобластей задаются дополнительные условия совместности по градиентам места и напряжениям. Полные деформации в «ядре» зерен и осредненные деформации в каждом бикристалле полагаются равными осредненным деформациям (т.е. принята гипотеза Фойгта).

Напряжения в зерне определяются осреднением по объему «ядра» и бикристаллов, окружающих зерно (с учетом объемной доли «ядра» и бикристаллической границы). В представительном объеме напряжения определяются осреднением по совокупности зерен (сумма напряжений в зернах, деленная на число зерен, составляющих представительный объем).

Полагается, что ГНД накапливаются с ростом деформации во внутренней части бикристаллов, их плотность определяется разностью пластических составляющих градиентов места в ядре и внутренней части бикристаллов. Появление ГНД связывают с дополнительным (по отношению к увеличению критических напряжений за счет статистически накопленных дислокаций) упрочнением систем скольжения. Предлагаемая модель использована для анализа одноосного растяжения образца с акцентом на проверку справедливости соотношения Холла–Петча. Результаты расчетов по предлагаемой модели сопоставлялись с теоретическими результатами прямого конечно-элементного моделирования и экспериментальными данными для поликристаллической меди со средним размером зерна 14, 33 и 220 мкм, показано их хорошее соответствие. Дальнейшее развитие данной модели на двухфазный материал (суперсплав на основе никеля) содержится в работе [75].

Построению физической теории, учитывающей наличие в деформируемом кристалле совокупностей дислокаций двух типов – СНД и ГНД – и основанной на термодинамическом подходе, посвящена работа [73]. Рассматривается случай малых градиентов перемещений, в силу чего системы скольжения полагаются фиксированными в отсчетной конфигурации. Наряду с мультипликативным разложением градиента места, скоростью пластической составляющей последнего, выраженной через скорости сдвига по СС, используется ротор и скорость ротора пластической составляющей градиента места, выражаемые линейными функциями скорости сдвигов и градиента скорости сдвигов. Вводится эволюционное уравнение для скорости суммарной (СНД+ГНД) плотности дислокаций, скорость изменения которой также представляется квазилинейной функцией скоростей сдвига и градиентов скоростей сдвига. Предлагается общая форма конститутивного соотношения, согласно которой отклик материала (например, тензор напряжений или свободная энергия) определяется независящей от выбора системы отсчета функцией температуры, тензора деформаций Коши–Грина, плотности дислокаций, градиента температуры, скорости сдвигов и градиента скорости сдвигов.

Рассматривается два метода вывода балансовых и конститутивных соотношений, основанных на термодинамическом подходе (в обоих используется неравенство Клаузиуса–Дюгема). В первом из них, названном моделью обобщенных внутренних переменных, сдвиги и градиенты сдвигов вводятся в уравнение баланса энергии и энтропии неявным образом через зависимость от указанных параметров свободной энергии. Во втором методе – «модели внутренних степеней свободы» – скорости сдвигов явным образом вводятся в выражение для скорости изменения полной энергии и энтропии, при этом появляется необходимость в определении дополнительных параметров, термодинамически сопряженных с новыми степенями свободы.

Предлагается два способа определения плотности ГНД. В первом из них, называемом моделью системы скольжения, векторная мера плотности ГНД определяется для систем скольжения через градиенты сдвигов по ним. Во втором способе («континуальном») векторная мера плотности ГНД вводится через ротор пластической составляющей градиента места. Для каждого из этих способов получены эволюционные уравнения для скорости изменения меры ГНД. В дальнейшем плотности СНД и ГНД вводятся в качестве аргументов функции свободной энергии; установленные эволюционные уравнения для СНД и ГНД вводятся в структуру полученных на основе термодинамического подхода эволюционных и конститутивных уравнений. Для замыкания полученной системы уравнений требуется дополнительное соотношение, не вытекающее из термодинамики; в качестве такого уравнения используется экспоненциальная зависимость скоростей сдвигов по СС от энергии активации Гиббса и температуры. Описан алгоритм включения предлагаемых моделей в конечно-элементную процедуру.

Развитие предложенного подхода на случай больших градиентов перемещений содержится в работе [74]. Рассматривается общий вид термодинамических потенциалов (функции свободной и накопленной упругой энергии, диссипативная функция), приведена формулировка вариационного термодинамического принципа в скоростной форме. Значительная часть работы посвящена анализу работ по обобщенным физическим теориям пластичности, основанных на рассмотрении СНД и ГНД. Показано, что часть из предлагаемых моделей может быть получена как частные случаи предлагаемого в статье формализма.

Вариант градиентной модели вязкопластичности предложен в работе [34]. В мультипликативное разложение градиента места авторами вводится промежуточный член $\mathbf{F}^g$, переводящий пластически деформированную конфигурацию в промежуточную (разгруженную),

$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^g \cdot \mathbf{F}^p$. Указанный член разложения связан с наличием ГНД и определяется по градиентам сдвигов в активированных СС; при этом ГНД порождают дальнодействующие поля внутренних напряжений. Скорости сдвигов в СС определяются степенным вязкопластическим законом, включающим как изотропное упрочнение, так и кинематическое, при этом оба члена в комбинированном законе упрочнения зависят от градиентов накопленных сдвигов. Детально описан алгоритм решения задачи. Для решения задачи на макроуровне применен МКЭ. Для анализа влияния градиентных членов рассмотрен пример одноосного циклического нагружения (растяжение-сжатие) образца из монокристаллического алюминия с сужением в центральной части. Отмечается, что учет градиентных членов ведет к более быстрому формированию шейки и повышению неоднородности пластических деформаций по образцу.

В последнее десятилетие весьма интенсивно работает над созданием градиентных физических моделей M.E.Gurtin с соавторами [19, 35–44, 53]. Остановимся подробнее на одной из последних работ этой группы исследователей [37]. Рассматривается случай малых градиентов перемещений, используется аддитивное разложение градиента скорости перемещений. Пластическая составляющая последнего определяется скоростями сдвигов по СС. В основу модели положен принцип виртуальной мощности. Наряду с обычными силовыми факторами (распределенными поверхностными и объемными силами, тензором напряжений Коши) в рассмотрение вводятся силовые факторы микроуровня: скалярное напряжение $\pi^{(k)}$ на k-й СС (сопряженное с соответствующей скоростью сдвига), вектор микроскопических напряжений $\xi^{(k)}$ (сопряженная переменная – градиент скорости сдвигов), скалярная распределенная поверхностная нагрузка $\chi^{(k)}$, сопряженная со скоростью сдвига по k-й СС.

Формулируя принцип виртуальной мощности для произвольной части монокристалла (равенство мощности работы внутренних и внешних сил на виртуальных скоростях макро- и микроуровня), производя типовые преобразования с использованием теоремы Гаусса–Остроградского, авторы записали условия Коши и уравнения равновесия для макропеременных, а также соответствующие уравнения для микропеременных:

$$\begin{aligned}&\chi^{(k)}(\mathbf{n}) = \xi^{(k)} \cdot \mathbf{n},\\ &\operatorname{div}\xi^{(k)} + \tau^{(k)} - \pi^{(k)} = 0,\end{aligned} \tag{25}$$

где $\mathbf{n}$ – единичная внешняя нормаль к рассматриваемой области, $\tau^{(k)}$ – сдвиговое напряжение на k-й СС. Для анализа физического смысла $\xi^{(k)}$ в рассмотрение вводятся краевые и винтовые дислокации, залегающие в СС; плотность дислокаций выражается через градиенты сдвигов в СС. Вектор микроскопических напряжений $\xi^{(k)}$ представляется суммой упругих и диссипативных напряжений, $\xi^{(k)} = \xi^{(k)}_{\mathrm{e}} + \xi^{(k)}_{\mathrm{dis}}$. Из рассмотрения свободной энергии Гельмгольца, определенной как сумма энергии на упругих макродеформациях и энергии дислокаций, следует, что $\xi^{(k)}_{\mathrm{e}}$ суть распределенные силы Печа–Колера на краевых и винтовых дислокациях.

Определяющие соотношения для диссипативных микронапряжений $\pi^{(k)}$ и $\xi^{(k)}_{\mathrm{dis}}$ строятся по аналогии с физическими вязкопластическими уравнениями. Для этого вводится «эффективная скорость течения» $d^{(k)} = \sqrt{\left|\dot{\gamma}^{(k)}\right|^2 + l^2\left|\nabla^{(k)}\dot{\gamma}^{(k)}\right|^2}$, где $\nabla^{(k)}$ – градиент, определенный в плоскости k-й СС, l – характерный масштаб. После этого диссипативные напряжения определяются следующими соотношениями:

$$\begin{aligned}&\pi^{(k)} = \tau^{(k)}_{\mathrm{c}} R(d^{(k)}) \frac{\dot{\gamma}^{(k)}}{d^{(k)}},\\ &\xi^{(k)}_{\mathrm{dis}} = \tau^{(k)}_{\mathrm{c}} R(d^{(k)}) l \frac{\nabla^{(k)}\dot{\gamma}^{(k)}}{d^{(k)}},\end{aligned} \tag{26}$$

где $R(d^{(k)})$ – индикаторная функция ($R(0)=0$, $R(d^{(k)})>0$ при $d^{(k)}\neq 0$), $\tau^{(k)}_c$ – сопротивление сдвигу на k-й СС. Благодаря подстановке (26) в (25) в конечном счете получили закон течения, связывающий $\tau^{(k)}$ со скоростями сдвигов, их первыми и вторыми градиентами на каждой СС. Приведены результаты решения тестовой двумерной задачи при различных параметрах упрочнения и характерных масштабах.

В работе [63] модель [40] в упругопластическом варианте применена для анализа деформирования тонкой (с толщинами 0,25, 0,5 и 1 мкм) пленки на упругом полупространстве. В начальный момент времени пленка и подложка нагреты до некоторой температуры, после чего система равномерно охлаждается; контакт предполагается идеальным, задача поставлена для условий ПДС; пластические деформации возникают вследствие разницы коэффициентов температурного расширения. В пленке существуют три СС, симметрично расположенные относительно нормали к поверхности. Симметрия СС и бесконечная протяженность пленки и подложки вдоль линии их сопряжения (в плоскости моделирования) позволяют перейти к краевой задаче для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка относительно скорости сдвига; получено аналитическое решение редуцированной задачи. Результаты ее решения сопоставляются с данными, полученными авторами ранее с помощью методов дислокационной динамики.

В [78] для вывода разрешающих соотношений градиентной модели упруговязкопластичности используется принцип виртуальных мощностей и линейная неравновесная термодинамика (неравенство Клаузиуса–Дюгема). Особое внимание уделяется межфазным границам (в частности, границам зерен), играющим важную роль в описании поведения субмикро- и нанокристаллических материалов. Для описания различных механизмов неупругого деформирования и упрочнения предлагается разделить обобщенные термодинамические силы на «энергетические» (связанные с возрастанием энергии дефектов и сопряженные с пластическими деформациями и их градиентами) и «диссипативные» (описывающие диссипацию энергии и сопряженные со скоростями пластических деформаций и их градиентами). При этом возникает необходимость во введении четырех характерных масштабов – двух («энергетического» и «диссипативного») для внутренних областей кристаллитов и двух – для межфазных границ.

Вариант основанной на термодинамическом подходе градиентной упруговязкопластической модели предложен в [79]. Для ясности изложение ведется на примере одномерной модели; в качестве независимых термодинамических переменных используются упругие деформации, сдвиги по СС и градиенты сдвигов. Из неотрицательности диссипации энергии получен общий вид определяющих соотношений, устанавливающих форму зависимости сопряженных термодинамических сил и содержащих производные свободной энергии по термодинамическим переменным. Рассмотрены два варианта выбора функции свободной энергии, выпуклой и невыпуклой; в первом случае свободная энергия зависит от квадратов упругой деформации и градиента сдвига; во втором случае добавляется степенной ряд по величине сдвига (до четвертой степени включительно), отмечается аналогия данного подхода с моделью фазового поля Гинсбурга–Ландау. На численных примерах одноосного монотонного нагружения стержня показаны качественные отличия результатов, полученных с применением выпуклой и невыпуклой функции свободной энергии. В частности, для невыпуклой функции на диаграмме напряжение–деформация имеет место участок разупрочнения, наблюдается локализация пластических сдвигов; при этом результаты существенно зависят от скорости деформирования и граничных условий.

Обширный обзор работ по градиентным моделям физических теорий пластичности содержится в статье [59]. Значительной внимание уделяется мультипликативному разложению градиента места на разных масштабных уровнях (монокристалла и поликристаллического агрегата) и связи его пластической составляющей с плотностью ГНД.

В последние 10–15 лет отмечается существенное повышение интереса к обобщенным континуумам типа Коссера [22], их обобщению на упругопластические среды и введение в физические теории пластичности [28–29]. В работах этого направления в духе континуума Коссера материальные частицы наделяются тремя дополнительными (к трансляционным) степенями свободы, которые обычно связываются с кривизнами–кручениями кристаллической решетки (которые, как и в градиентных моделях, порождаются геометрически необходимыми дислокациями); вводится энергетически сопряженный тензору кривизн–кручений тензор моментных напряжений. Для тензоров деформаций и кривизн–кручений (или их скоростей) часто принимается аддитивное разложение на упругую и пластическую составляющие. Для определения неупругих деформаций и искажений кристаллической решетки применяются вязкопластические законы, связывающие соответственно скорости сдвигов и поворотов с тензором напряжений Коши и тензором моментных напряжений. Модифицированная физическая модель использована для исследования устойчивости пластического деформирования монокристаллов, анализа поведения одно- и двухфазных поликристаллических материалов при различной величине среднего размера зерна.

В работе [49] рассматривается модификация вязкопластической модели [16, 62]. Описание трансляционной моды деформации аналогично принятым в большинстве работ (мультипликативное разложение градиента места, степенной вязкопластический закон); при этом упругими деформациями пренебрегается и упругая составляющая градиента места полагается ортогональным тензором. Выделяются симметричные и антисимметричные части скоростей сдвигов и напряжений Коши. Из уравнения момента количества движения в пренебрежении массовыми моментами следует

$$2\boldsymbol{\sigma}^{(\mathrm{A})} + \boldsymbol{\epsilon}(\hat{\nabla} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}) = \mathbf{0}, \tag{27}$$

где $\boldsymbol{\sigma}^{(\mathrm{A})} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^{T}\right)$ – антисимметричная часть тензора напряжений Коши, $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ – тензор моментных напряжений. Получено следующее выражение принципа виртуальной мощности:

$$\int_V \boldsymbol{\sigma}^{(\mathrm{S})} : \delta\mathbf{D}\mathrm{d}V + \int_V \hat{\boldsymbol{\mu}} : \delta\dot{\boldsymbol{\chi}}\mathrm{d}V = \int_S \hat{\mathbf{t}} \cdot \delta\mathbf{v}\mathrm{d}S + \int_S \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \delta\boldsymbol{\omega}\mathrm{d}S, \tag{28}$$

где $\boldsymbol{\sigma}^{(\mathrm{S})}$ – симметричная часть тензора напряжений Коши, $\boldsymbol{\omega}$ – вектор скорости «материального поворота» (ассоциированный с тензором вихря $\mathbf{W}$), $\dot{\boldsymbol{\chi}} = \hat{\nabla}\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}$, $\hat{\mathbf{t}}$ – вектор поверхностных сил, $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ – вектор поверхностных моментов. Для понижения порядка аппроксимации предлагается модификация уравнения (28), в которое вводится добавочный поверхностный интеграл, позволяющий учесть разрывы в моментных напряжениях на границах элементов. Приведен вывод конечно-элементных соотношений. Отдельный раздел посвящен определяющим соотношениям для ротационной моды, в качестве которых предлагается линейное уравнение

$$\frac{\boldsymbol{\mu}}{\mu_e} = \mathrm{L}\frac{\dot{\boldsymbol{\chi}}}{\dot{\chi}_e}, \tag{29}$$

где L – константа пропорциональности, $\mu_e = \left(\frac{1}{\mathrm{L}}\boldsymbol{\mu} : \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}}\right)^{1/2}$, $\dot{\chi}_e = \left(\mathrm{L}\dot{\boldsymbol{\chi}} : \dot{\boldsymbol{\chi}}^{\mathrm{T}}\right)^{1/2}$; здесь нужно отметить некоторую непоследовательность при введении константы L. С одной стороны, при подстановке интенсивностей в соотношение (29) эта величина сокращается, с другой стороны, в цитируемой работе эта величина «для определенности» принимается равной 1. Эффективные моментные напряжения и кривизны–кручения полагаются связанными линейным соотношением $\mu_e = C\,\chi_e$.

С использованием предлагаемой модели решены задачи исследования поведения моно- и бикристалла с ГЦК-решетками при осадке в условиях плоско-деформированного состояния. Расчеты проводились как с учетом моментных напряжений, так и без них; во втором случае проведено сопоставление с моделью Бишопа–Хилла; отмечается, что при уменьшении показателя скоростной чувствительности вязкопластической модели результаты приближаются к полученным по жесткопластической модели (Бишопа–Хилла). Показано, что учет ротационной моды и моментных напряжений существенно влияет на форму свободной поверхности образца (особенно вблизи контактной поверхности и поверхности раздела в бикристалле), на зависимость нагрузки от деформации.

В работах [3–5, 13] предлагается упруговязкопластическая физическая теория, построенная на несимметричных мерах напряженного и деформированного состояния, предназначенная для описания эволюции мезо- и микроструктуры моно- и поликристаллических материалов в процессах интенсивных пластических деформаций (ИПД), в том числе для описания формирования текстуры. Показано, что при использовании несимметричных мер напряженного и деформированного состояния в математической модели мезоуровня некоторые из проблемных вопросов физических теорий (неоднозначность в определении активных СС; внесение в основные соотношения теорий физически необоснованных величин; противоречия в уравнениях баланса при рассмотрении процессов, связанных с интенсивными ротациями кристаллической решетки) можно разрешить без введения дополнительных гипотез [3]. Предлагается общая структура двухуровневой (мезо- и макроуровни) математической модели для описания деформирования поликристаллического агрегата в процессах ИПД: задается схема деформирования на макроуровне, на мезоуровне (зерно, субзерно) принимается модифицированная гипотеза Фойгта для меры скорости деформации. На макроуровне используется симметричный закон Гука в скоростной релаксационной форме; скорость пластических деформаций определяется из модели мезоуровня по скоростям сдвигов по активным системам скольжения (СС), для поиска которых, в свою очередь, используется определяющее соотношение вязкого типа. Предполагается, что процессы деформирования являются квазистатическими и протекают при низких гомологических температурах. Рассматриваются несимметричные меры скорости деформации и напряжений на мезоуровне; в качестве меры скорости деформации предлагается использовать транспонированный градиент скорости перемещений $\boldsymbol{\zeta} = \mathbf{v}\hat{\nabla}$. Мера деформированного состояния на мезоуровне $\mathbf{q}$ определяется коротационным интегрированием соотношения $\mathbf{q}^r = \dot{\mathbf{q}} - \mathbf{w}\cdot\mathbf{q} + \mathbf{q}\cdot\mathbf{w} = \boldsymbol{\zeta} = \mathbf{v}\hat{\nabla}$. В качестве спина на мезоуровне предлагается использовать спин решетки **w**, то есть тензор, ассоциированный с вектором мгновенной скорости вращения кристаллической решетки. В качестве меры напряженного состояния используется тензор напряжений Коши без дополнительного предположения о его симметрии. Показано, что кривая, соответствующая несимметричному случаю, всегда лежит ниже кривой, соответствующей симметричной теории.

Отдельно обсуждаются вопросы построения несимметричного закона упругости на мезоуровне. Из классического вывода закона упругости можно утверждать симметрию тензора 4-го ранга $\mathbf{c}$, описывающего упругие свойства материала, по парам индексов, $c_{ijkl} = c_{klij}$. Утверждать симметрию $\mathbf{c}$ внутри пар индексов нельзя в силу несимметрии на мезоуровне мер напряженного и деформированного состояний. Показано, что для материала с кубической симметрией тензор упругих свойств $\mathbf{c}$ имеет 4 независимые ненулевые компоненты – $c_{1111}, c_{1122}, c_{1212}, c_{1221}$; предлагается методика численной идентификации компонент c_{1212}, c_{1221}, полагающихся в классической теории совпадающими [4].

Предложен новый способ описания эволюции ориентаций решеток зерен как следствия несовместности пластических деформаций в соседних элементах ротации, а также несбалансированных усилий на границе элемента ротации вследствие несимметрии тензора напряжений Коши. Отдельно рассмотрены вопросы перехода от величин мезоуровня на макроуровень, в частности подходы к определению макроповорота [13].

Результаты моделирования, в том числе эволюция функции распределения ориентаций решеток зерен, для поликристалла при нагружениях, соответствующих осадке, стесненной осадке и равноканальному угловому прессованию, удовлетворительно согласуются с известными теоретическими и экспериментальными результатами.

К направлению, связанному с понятием «геометрически необходимой дислокации» (ГНД, GND), относится работа [54]. Отмечается, что основанные на однородности деформирования (сдвигом) модели и связанные с ней однородности распределения дислокаций в системах скольжения оказываются недостаточно адекватными при описании поведения материала на более малых масштабах. Для описания локальных искажений (кривизн–кручений) кристаллической решетки требуется введение неоднородных дислокационных субструктур, которые авторы также относят к «геометрически необходимым дислокациям». В связи с этим приведенная в [57] модель модифицируется введением дополнительной внутренней переменной – тензора плотности ГНД и кинетического уравнения для него, определяющего скорость изменения тензора ГНД через градиент скорости сдвигов. Последнее при использовании предлагаемой модели совместно с конечно-элементным пакетом требует вычисления в каждой гауссовой точке интегрирования вычисления указанных градиентов, что существенно усложняет процедуру интегрирования, в связи с чем значительная часть работы посвящена описанию предлагаемого авторами эффективного алгоритма интегрирования. Разработанный алгоритм встроен в коммерческий конечно-элементный пакет MSC.Marc200x и использован для анализа деформирования простым сдвигом монокристаллического алюминиевого образца. Сопоставление результатов расчета (кривые сдвиговые напряжения – сдвиговые деформации, интенсивности деформаций на боковой поверхности образца, сдвиговая деформация – до 55 %) с полученными авторами экспериментальными данными показывает хорошее соответствие. Для анализа влияния масштабного фактора проведены расчеты для образцов с уменьшенной высотой (1/2 и 1/10 от исходного), показано, что с уменьшением высоты образца повышаются сдвиговые напряжения и существенно изменяются поля плотности дислокаций и разориентаций решетки.

В статье [56], являющейся развитием рассмотренных выше работ авторов, отмечается важность учета в моделях поликристаллов границ зерен, которые могут служить мощными препятствиями для мобильных дислокаций. Предполагается, что подвижные дислокации могут пересекать границу зерен, оставляя в ней дислокации ориентационного несоответствия (ДОН), параметры которых авторы предлагают определять из условия минимума энергии ДОН. Для моделирования влияния границ предлагается использовать, как и для внутренности зерен, вязкопластическую модель с дополнительной энергией активации, пропорциональной энергии образования ДОН. Для численной реализации модели также применяется конечно-элементный пакет MSC.Marc200x и специальные элементы для учета границ зерен.

Разработанная модель применена для анализа процесса деформирования бикристалла с ГЦК-решеткой (алюминий) для трех разориентировок (авторы называют их «малой», «средней» и «большой»). В проведенных экспериментах и численных расчетах (простой сдвиг до 50 %) показано, что по мере увеличения разориентировок возрастает неоднородность интенсивности деформаций в кристаллах, составляющих бикристалл, что обусловлено возрастающим сопротивлением движению дислокаций границы кристаллов. Сопоставление результатов экспериментально измеренных на боковой поверхности образца интенсивностей деформаций и ориентировок с данными расчетов показывает хорошее соответствие.

В статье [55] рассматривается модификация предложенной авторами модели [54, 56] для описания поведения моно- и поликристаллов с ОЦК-решеткой. В отличие от ГЦК-кристаллов, где барьер Пайерлса мал по сравнению с сопротивлением дислокаций леса движению мобильных дислокаций, для ОЦК-кристаллов, напротив, можно пренебречь напряжениями от леса дислокаций в сравнении с напряжением Пайерлса; в остальном модель не отличается от изложенной в цитируемых выше работах. Модифицированная модель использована для анализа деформирования бикристалла ниобия при выдавливании образца через прямоугольную матрицу. Результаты расчетов сопоставляются с данными проведенных авторами экспериментов. Отмечается, что лучшее соответствие достигается при использовании для ОЦК-решетки в качестве потенциально активных систем скольжения <111>, {110} и <111>, {112}.

Отдельную группу составляют модели, являющиеся, по сути, развитием теории скольжения Батдорфа–Будянского [1–2], которые представляется возможным назвать «квазифизическими». Остановимся на одной из последних работ [68], содержащей краткий обзор моделей данной группы.

В цитируемой работе предполагается, что механическое поведение поликристаллического материала с хорошей точностью может быть описано небольшим (от 5 до 10) числом структурных элементов (СЭ), называемых авторами «зернами» (следует подчеркнуть, что в общем случае СЭ не являются зернами в обычном смысле, каждый СЭ может описывать поведение конгломерата зерен). СЭ выбираются в форме куба (хотя форма особого значения не имеет), в котором назначаются 6 независимых «систем скольжения»; заметим, что к СС в монокристаллах в общем случае (если СЭ действительно не представляет собой зерно) эти «системы скольжения» никакого отношения не имеют. Как и в физических теориях упруговязкопластичности, пластические деформации полагаются изохорическими, реализующимися сдвигом по введенным «системам скольжения». Используется неизотропный закон упрочнения (деформационное и латентное упрочнения определяются отличающимися модулями упрочнения); кроме того, для «систем скольжения» СЭ учитывается кинематическое упрочнение.

Модель ориентирована на совместное использование с МКЭ с высокой степенью аппроксимации и применением численного интегрирования по конечным элементам. Каждой точке интегрирования «приписывается» один или несколько (с использованием процедуры осреднения) СЭ с определенной ориентацией; ориентации СЭ определяются в соответствии с полюсными фигурами материала исследуемой области. На уровне конечных элементов (макроуровень) в качестве ОС используется закон Гука в релаксационной скоростной форме; скорости пластической деформации определяются в каждой точке интегрирования из упомянутых выше вязкопластических соотношений для соответствующих (одного или нескольких) СЭ.

Предложенная модель использована для решения нескольких тестовых задач (растяжение и простой сдвиг образцов, растяжение тонкой пластины с круговым отверстием). Сопоставление результатов с экспериментальными данными и результатами, полученными с помощью классической теории течения и физической теории упруговязкопластичности (40 зерен на КЭ) показывает их хорошее соответствие. При этом время расчетов по предлагаемой модели сопоставимо (превосходит не более чем на порядок при использовании 7 СЭ на точку интегрирования) время решения по теории течения и в 10–15 раз меньше времени расчета по физической теории.

7. Структурно-аналитическая теория

Значительный вклад в развитие физических теорий внесен работами В.А. Лихачева и В.Г. Малинина. Обобщающие результаты многолетней работы по созданию модели, названной авторами структурно-аналитической теорией прочности и пластичности, содержатся в монографии [6], где приведен также весьма обширный список публикаций авторов.

Анализируя состояние физических теорий пластичности, авторы отмечают, что основным концептуальным недостатком этих теорий являлась попытка описать процессы деформирования, основываясь на рассмотрении поведения самой малой части, которую можно выделить в материале (например, субзерно, фрагмент), неучет самоорганизованной многомасштабности процессов неупругого деформирования и разрушения.

В основу теории авторами положены следующие положения:

1. Для описания поведения материала используется двухуровневая модель (микро- и макроуровень), для каждого из уровней вводится представительный объем; в пределах представительного объема соответствующие параметры каждого из уровней полагаются однородными.

2. Все микрообъемы взаимодействуют друг с другом через микронапряжения. При этом вводится дополнительное поле микронапряжений, разделенное на две составляющие – ориентированные и неориентированные микронапряжения. Поля ориентированных микронапряжений порождаются неоднородными неупругими макродеформациями и не исчезают при снятии внешней нагрузки (в макросмысле). Поля неориентированных микронапряжений обусловливаются многими причинами, к числу которых относятся: несовместности температурных деформаций микрообъемов, неоднородности упругих характеристик на микроуровне, неоднородностей магнитострикционных и электрострикционных микродеформаций, неоднородность неупругих микродеформаций.

3. Процессы деформирования на микро- и макроуровнях связаны между собой через соответствующие поля напряжений и деформаций.

4. Физические константы теории являются фундаментальными характеристиками материала и не зависят от способа их калибровки в макроэкспериментах (принцип локальной калибровочной инвариантности).

В качестве процедуры осреднения принимается ориентационное и статистическое осреднение (по некоторым параметрам).

Детально анализируются большинство из известных механизмов упругого и неупругого деформирования (температурные, магнитострикционные, электрострикционные, диффузионные, вязкие (деформации ползучести), сдвиговые (за счет скольжения дислокаций), деформации двойникования, деформации за счет мартенситных реакций. Для каждого из указанных механизмов записываются определяющие напряжения микроуровня, связывающие скорости микродеформаций со скоростями и полными эффективными микронапряжениями. Для тензора скорости микродеформаций принимается гипотеза об аддитивности скоростей микродеформаций по всем реализующимся механизмам.

Учитывая тот факт, что основными механизмами неупругого деформирования моно- и поликристаллических металлов являются кристаллографический сдвиг и двойникование, рассмотрение этих механизмов выделено в отдельную главу. Приведены соотношения конститутивной модели для описания пластического деформирования, деформаций ползучести (с разделением их на деформации ползучести, обусловленные возвратом, и деформации термоактивируемой ползучести). Приведены результаты численных расчетов для различных пропорциональных и сложных нагружений, отмечается их хорошее качественное соответствие экспериментальным данным. Значительная часть монографии посвящена анализу прочности и разрушения поликристаллов, а также рассмотрению деформирования материалов с мартенситным механизмом неупругого деформирования (в частности, материалов, обладающих эффектом памяти формы). Указанные вопросы выходят за рамки тематики предлагаемой работы; интересующийся читатель может найти сведения о моделях материалов, описывающих твердотельные фазовые переходы, и чрезвычайно обширные экспериментальные данные в справочнике [8].

Библиографический список

1. Батдорф С.Б., Будянский Б.А. Зависимость между напряжениями и деформациями для упрочняющегося металла при сложном напряженном состоянии // Механика: сб. переводов. – 1955. – № 5. – С. 120–127.

2. Батдорф С.Б., Будянский Б.А. Математическая теория пластичности, основанная на концепции скольжения // Механика: сб. переводов. – 1962. – № 1. – С. 135–155.

3. Волегов П.С., Никитюк А.С., Янц А.Ю. Геометрия поверхности текучести и законы упрочнения в физических теориях пластичности // Вестник ПГТУ. Математическое моделирование систем и процессов. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2009. – № 17. – С. 25–33.

4. Волегов П.С., Шулепов А.В. Упругие константы монокристалла в несимметричной физической теории пластичности // Вестник ПГТУ. Механика. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2010. – № 1. – С. 19–34.

5. Волегов П.С., Янц А.Ю. Несимметричная физическая теория пластичности ГЦК-поликристаллов: особенности численной реализации некоторых схем деформирования // Вестник ПГТУ. Механика. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2011. – № 1. – С. 121–137.

6. Лихачев В.А., Малинин В.Г. Структурно-аналитическая теория прочности. – СПб.: Наука, 1993. – 471 с.

7. Мак Лин Д. Механические свойства металлов – М: Металлургиздат, 1965. – 432 с.

8. Материалы с эффектом памяти формы: справ.: в 4 т. / под ред. В.А. Лихачева / С.П. Беляев, А.Е. Волков, В.А. Ермолаев, З.П. Каменцева, С.Л. Кузьмин, В.А. Лихачев, В.Ф. Мозгунов, А.И. Разов, Р.Ю. Хайров. – СПб: Изд-во НИИХ СПбГУ. – 1998.

9. Миркин Л.И. Физические основы прочности и пластичности. – М: Изд-во МГУ, 1968. – 538 с.

10. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М.: Металлургия, 1986. – 224 с.

11. Трусов П.В., Волегов П.С. Определяющие соотношения с внутренними переменными и их применение для описания упрочнения в монокристаллах // Физическая мезомеханика. – 2009. – Т. 12, № 5. – С. 65–72.

12. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: приложение к описанию упрочнения в поликристаллах // Вестник Тамбов. ун-та. Естественные и технические науки. – Тамбов, 2010. – Т. 15, вып. 3. Ч. 1. – С. 983–984.

13. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Несимметричная физическая теория пластичности для описания эволюции микроструктуры поликристалла // Физическая мезомеханика. – Томск, 2011. – Т. 14, № 1. – С. 19–31.

14. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Описание внутризеренного и зернограничного упрочнения моно- и поликристаллов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – СПб, 2010. – № 2 (98). – С. 110–119.

15. Alankar A., Mastorakos I. N., Field D.P. A dislocation-density-based 3D crystal plasticity model for pure aluminum // Acta Materialia. – 2009. – Vol. 57. – P. 5936–5946.

16. Asaro R.J. Micromechanics of crystals and polycrystals // Advances in Applied Mechanics. – 1983. – Vol. 23. – P. 1–115.

17. Ashby M.F. The deformation of plastically non-homogeneous materials // Phil. Mag. – 1970. – Vol. 21. – P. 399–424.

18. Balasubramanian S., Anand L. Elasto-viscoplastic constitutive equations for polycrystalline fcc materials at low homologous temperatures // J. Mech. and Phys. Solids. – 2002. – Vol. 50. – P. 101–126.

19. Bittencourt E., Needleman A., Gurtin M.E., Van der Giessen E. A comparison of nonlocal continuum and discrete dislocation plasticity predictions // J. Mech. Phys. Solids. – 2003. – Vol. 51. – P. 281–310.

20. Computational crystal plasticity: from single crystal to homogenized polycrystal / G. Cailletaud, O. Diard, F. Feyel, S. Forest // Technische Mechanik. – 2003. – Band 23. Heft 2–4. – P. 130–145.

21. Cermelli P., Gurtin M.E. On the characterization of geometrically necessary dislocations in finite plasticity // J. Mech. Phys. Solids. – 2001. – Vol. 49 – P. 1539–1568.

22. Cosserat E., Cosserat F. Theorie des corps deformables. – Paris: A. Hermann et fils. – 1909. – 226 p.

23. Diard O., Leclercq S., Rousselier G., Cailletaud G. Evaluation of finite element based analysis of 3D multicrystalline aggregates plasticity. Application to crystal plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries // Int. J. of Plasticity. – 2005. – Vol. 21. – P. 691–722.

24. Crystal plasticity model with enhanced hardening by geometrically necessary dislocation accumulation / L.P. Evers, D.M. Parks, W.A.M. Brekelmans, M.G.D. Geers // J. Mech. and Phys. Solids. – 2002. – Vol. 50. – P. 2403–2424.

25. Fajoui J., Gloaguen D., Courant B., Guillén R. Micromechanical modelling of the elastoplastic behavior of metallic material under strain-path changes // Comput. Mech. – 2009. – Vol. 44. – P. 285–296.

26. Fleck N.A., Hutchinson J.W. Strain gradient plasticity // Adv. Appl. Mech. – 1997. – Vol. 33. – P. 295–362.

27. Follansbee P.S., Kocks U.F. A constitutive description of copper based on the use of the mechanical threshold stress as an Internal State Variable // Acta Metall. – 1988. – Vol. 36. – P. 81–93.

28. Forest S. Modeling slip, kink and shear banding in classical and generalized single crystal plasticity // Acta mater. – 1998. – Vol. 46, No. 9. – P. 3265–3281.
29. Forest S., Barbe F., Cailletaud G. Cosserat modelling of size effects in the mechanical behaviourof polycrystals and multi-phase materials // Int. J. Solids Struct. – 2000. – Vol. 37. – P. 7105–7126.
30. Franciosi P. The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals // Acta Metall. – 1985. – Vol. 33. – P. 1601–1612.
31. Franciosi P., Berveiller M., Zaoui A. Latent hardening in copper and aluminium single crystals // Acta Metall. – 1980. – Vol. 28. – Is. 3 – P. 273–283.
32. Franz G., Abed-Meraim F., Ben Zineb T. Strain localization analysis using a multiscale model // Computational Materials Science. – 2009. – Vol. 45. – P. 768–773.
33. Gérard C., Bacroix B., Bornert M., Cailletaud G., Crépin J., Leclercq S. Hardening description for FCC materials under complex loading paths // Comput. Mater. Sci. – 2009. – Vol. 45. – P. 751–755.
34. Gerken, J. M., Dawson P.R. A crystal plasticity model that incorporates stresses and strains due to slip gradients// J. of the Mechanics and Physics of Solids. – 2008. – Vol. 6. – P. 1651–1672.
35. Gurtin M.E, Anand L. A gradient theory for single-crystal plasticity // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. – 2007. – Vol.15. – S. 263–S270.
36. Gurtin M.E., Anand L. A theory of strain-gradient plasticity for isotropic, plastically irrotational materials. Part I: Small deformations // J. Mech. Phys. Solids. – 2005. – Vol. 53. – P. 1624–1649.
37. Gurtin M.E., Anand L., Lele S.P. Gradient single-crystal plasticity with free energy dependent on dislocation densities // J. Mech. Phys. Solids. – 2007. – doi:10.1016/j.jmps.2007.02.006.
38. Gurtin M.E., Anand, L. A theory of strain-gradient plasticity for isotropic, plastically irrotational materials. Part II: Finite deformations // Int. J. Plasticity. – 2005. – Vol. 21. – P. 2297–2318.
39. Gurtin M.E., Needleman A. Boundary conditions in small-deformation, single-crystal plasticity that account for the Burgers vector // J. Mech. Phys. Solids. – 2005. – Vol. 53. – P. 1–31.
40. Gurtin, M.E. A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations // J. Mech. Phys. Solids. – 2002. – Vol. 50. – P. 5–32.
41. Gurtin, M.E. A gradient theory of small-deformation isotropic plasticity that accounts for the Burgers vector and for dissipation due to plastic spin // J. Mech. Phys. Solids. – 2004. – Vol. 52 – P. 2545–2568.

42. Gurtin, M.E. On a framework for small-deformation viscoplasticity: free energy, microscopic forces, strain gradients // Int. J. Plasticity. – 2003. – Vol. 19 – P. 47–90.

43. Gurtin, M.E. On the plasticity of single crystals: free energy, microscopic forces, plastic strain gradients // J. Mech. Phys. Solids. – 2000. – Vol. 48. – P. 989–1036.

44. Gurtin, M.E. The Burgers vector and the flow of screw and edge dislocations in finite-deformation single crystal plasticity // J. Mech. Phys. Solids. – 2006. – Vol. 54. – P. 1882–1898.

45. Harder J. FEM-simulation of the hardening behavior of FCC single crystals // Acta Mechanica. – 2001. – Vol. 150 – P. 197–217.

46. Kalidindi S.R. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models//J. Mech. Phys. Solids. – 1998. –Vol. 46, No. 2. – P. 267–290.

47. Kalidindi S.R. Modeling anisotropic strain hardening and deformation textures in low stacking fault energy fcc metals // Int. J. Plasticity. – 2001. – Vol. 17. – P. 837–860.

48. Kalidindi S.R., Bronkhorst C.A., Anand L. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals // J. Mech. Phys. Solids. – 1992. – Vol. 40, No. 3. – P. 537–569.

49. Kim H.-K., Oh S.-I. Finite element analysis of grain-by-grain deformation by crystal plasticity with couple stress // Int. J. Plasticity. – 2003. – Vol. 19. – P. 1245–1270.

50. Kocks U.F. The relation between polycrystal deformation and single crystal deformation // Metal. Trans. –1970. –Vol. 1,No. 5. – P. 1121–1143.

51. Kok S., Beaudoin A.J., Tortorelli D.A. A polycrystal plasticity model based on the mechanical threshold // Int. J. Plasticity. – 2002. – Vol. 18. – P. 715–741.

52. Kratochvil J. A theory of non-proportional cyclic plasticity based on micromechanical approach // Proc. of IMMM-93. Int. Sem. On Microstruct. And Mech. Properties of New Enineering Mater. – Mie Academic Press. – 1993. – P. 89–94.

53. Lele S.P. On a class of strain gradient plasticity theories: formulation and numerical implementation // Thesis PhD. Massachusetts Inst. of Technology. – 2008. – 251 p.

54. Ma A., Roters F., Raabe D. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations // Acta Materialia. – 2006. – Vol. 54. – P. 2169–2179.

55. Ma A., Roters F., Raabe D. A dislocation density based constitutive law for BCC materials in crystal plasticity FEM // Computational Materials Science. – 2007. – Vol. 39. – P. 91–95.

56. Ma A., Roters F., Raabe D. On the consideration of interactions between dislocations and grain boundaries in crystal plasticity finite element modeling – Theory, experiments, and simulations // Acta Materialia. – 2006. – Vol. 54. – P. 2181–2194.

57. Ma A., Roters F.A. A constitutive model for fcc single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminium single crystals //Acta Materialia. – 2004. – Vol. 52 – P. 3603–3612.

58. Application of a substructure-based hardening model to copper under loading path changes / S. Mahesh, C.N. Tome, R.J. McCabe, G.C. Kaschner, I.J. Beyerlein and A. Misra // Metallurgical and Mater. Trans. A. – 2004. – Vol. 35A. – P. 3763–3774.

59. McDowell D. L. Viscoplasticity of heterogeneous metallic materials // Mater. Sci. Eng. R. – 2008. – Vol. 62. – P. 67–123.

60. Méric L., Cailletaud G., Gaspérini M. F.E. calculations of copper bicrystal specimens submitted to tension-compression tests // Acta Metall. – 1994. – Vol. 42. – Is. 3. – P. 921–935.

61. Mindlin R.D. Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity // Int. J. of Solids and Structures. – Vol. 1, Is. 4. – P. 417–438.

62. Needleman A., Asaro R.J., Lemonds J., Peirce D. Finite element analysis of crystalline solids // Comp. Meth. Appl. Mech. Engng. – 1985. – Vol. 52. – P. 689–708.

63. Nicola L., Van der Giessen E., Gurtin M. E. Effect of defect energy on strain-gradient predictions of confined single-crystal plasticity // J. Mech. Physics Solids. – 2005. – Vol. 53. – P. 1280–1294.

64. Nye J.F. Some geometrical relations in dislocated crystals // Acta Metall. – 1953. – Vol. 1. – P. 153–162.

65. Work hardening–softening behaviour of b.c.c polycrystalls during changing strain paths: I. An integrated model based on substructure and texture evolution, and its prediction of the stress–stpain of an IF steel during two–stage strain paths / B. Peeters, M. Seefeldt, C. Teodosiu, P. Van Houtte, E. Aernoudt // Acta Mater. – 2001. – Vol. 49. – P. 1607–1619.

66. Work hardening–softening behaviour of b.c.c polycrystalls during changing strain paths: II. TEM observations of dislocation sheets in an IF steel during two–stage strain paths and their representation in terms of dislocation densities / B. Peeters, B. Bacroix, C. Teodosiu, P. Van Houtte, E. Aernoudt // Acta Mater. – 2001. – Vol. 49. – P. 1621–1632.

67. A new mean field micromechanical approach to capture grain size effects / J.-M. Pipard, N. Nicaise, S. Berbenni, O. Bouaziz, M. Berveiller // Comput. мater. sci. – 2009. – Vol. 45. – P. 604–610.
68. Rousselier G., Leclercq S. A simplified ‘‘polycrystalline’’ model for viscoplastic and damage finite element analyses // Int. J. Plasticity. – 2006. –Vol. 22. – P. 685–712.
69. Sauzay M. Analytical modelling of intragranular backstresses due to deformation induced dislocation microstructures // Int. J. Plasticity. – 2008. – Vol. 24. – P. 727–745.
70. Modelling the behaviour of polycrystalline austenitic steel with twinning-induced plasticity effect / M.N. Shiekhelsouk, V. Favier, K. Inal, M. Cherkaou // Int. J. Plast. – 2009. – Vol. 25. – P. 105–133.
71. Shu J.Y., Fleck N.A. Strain gradient crystal plasticity: size-dependent deformation of bicrystals // J. Mech. and Phys. Solids. – 1999. – Vol. 47. – P. 297–324.
72. Steck E. A., Harder J. Finite element simulation of local plastic flow in polycrystals // IVTAM Symposium on Micro- and Macrostructural Aspects of Thermoplasticity / O. T. Bruhns and E. Stein (eds.). – 1999. – P. 79–88.
73. Svendsen B. Continuum thermodynamic models for crystal plasticity including the effects of geometrically-necessary dislocations//J. Mech. Phys. Solids. – 2002. – Vol. 50. – P. 1297–1329.
74. Svendsen B., Bargmann S. On the continuum thermodynamic rate variational formulation of models for extended crystal plasticity at large deformation // J. of the Mechanics and Physics of Solids. – 2010. – Vol. 58, Is. 9. – P. 1253–1271.
75. Tinga T., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. A strain-gradient crystal plasticity framework for single crystal nickel-based superalloys// Report National Aerospace Laboratory NLR-TP-2005-628. – Amsterdam, 2005. – 35 p.
76. Trusov P.V., Volegov P.S. Internal variable constitutive relations and their application to description of hardening in single crystals // Physical Mesomechanics. – 2010. – Vol. 13, Is. 3–4. – P. 152–158.
77. Viatkina E.M., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. Numerical analysis of strain path dependency in FCC metals // Comput Mech. – 2008. – Vol. 41. – P. 391–405.
78. Voyiadjis G.Z., Almasri A.H. A physically based constitutive model for fcc metals with applications to dynamic hardness //Mechanics of Materials. – 2008. – Vol. 40. – P. 549–563.

79. Yalcinkaya T., M.Brekelmans W.A., Geers M.G.D. Deformation patterning driven by rate dependent non-convex strain gradient plasticity // J. Mech. Phys. Solids. – 2011. – Vol. 59 – P.1–17.

References

1. Batdorf S.B., Budjanskij B.A. The relationship between stress and strain in the hardening metals to a complex stress state [Zavisimost' mezhdu napryazheniyami i deformaciyami dlya uprochnyayuwegosya metalla pri slozhnom napryazhennom sostoyanii] *Mehanika – Mechanics*, 1955, No. 5, P. 120–127.

2. Batdorf S.B., Budjanskij B.A. The mathematical theory of plasticity based on the concept of slipping [Matematicheskaya teoriya plastichnosti, osnovannaya na koncepcii skol'zheniya]. *Mehanika – Mechanics,* 1962, No. 1, P. 135–155.

3. Volegov P.S., Nikityuk A.S., Janz A.Yu. The geometry of the yield surface and hardening laws in crystal plasticity [Geometriya poverhnosti tekuchesti i zakony uprochneniya v fizicheskih teoriyah plastichnosti]. *Vestnik PGTU. Matematicheskoe modelirovanie sistem i processov – Perm State Technical University Mathematical Modeling of Systems and Processes Bulletin*, 2009, No. 17, P. 25–33.

4. Volegov P.S., Shulepov A.V. The elastic constants of single crystal in asymmetric crystal plasticity theory [Uprugie konstanty monokristalla v nesimmetrichnoj fizicheskoj teorii plastichnosti]. *Vestnik PGTU. Mehanika – Perm State Technical University Mechanics Bulletin*, 2010, No. 1, P. 19–34.

5. Volegov P.S., Yanz A.Yu. Asymmetric physical crystal plasticity theory of fcc polycrystals: a numerical implementation of some deformation schemes [Nesimmetrichnaya fizicheskaya teoriya plastichnosti GTSK-polikristallov: osobennosti chislennoj realizatsii nekotorykh skhem deformirovaniya]. *Vestnik PGTU. Mehanika – Perm State Technical University Mechanics Bulletin*, 2010, No. 1, P. 121–137.

6. Likhachev V.A., Malinin V.G. Structural – analytical theory of strength [*Strukturno-analiticheskaya teoriya prochnosti*]. Saint-Petersburg, 1993, 471 p.

7. McLin D. Mechanical properties of metals [*Mekhanicheskie svojstva metallov*]. Moscow, 1965, 432 p.

8. Belyaev S.P., Volkov A.E., Ermolaev V.A., Kamentseva Z.P., Kuz'min S.L., Likhachev V.A., Mozgunov V.F., Razov A.I., Khajrov R.Yu.

Materials with shape memory effect [*Materialy s ehffektom pamyati formy*]. Saint-Petersburg, 1998. (Vol. 1 – 424 p., Vol. 2 – 374 p., Vol. 3 – 474 p., Vol. 4 – 268 p.).

9. Mirkin L.I. Physical bases of strength and plasticity [*Fizicheskie osnovy prochnosti i plastichnosti*]. Moscow, 1968, 538 p.

10. Rybin V.V. Large plastic deformation and fracture of metals [*Bol'shie plasticheskie deformatsii i razrushenie metallov*]. Moscow, 1986, 224 p.

11. Trusov P.V., Volegov P.S. Constitutive relations and their application to the description of microstructure evolution [Opredelyayushhie sootnosheniya s vnutrennimi peremennymi i ih primenenie dlya opisaniya uprochneniya v monokristallah]. *Fizicheskaya mezomehanika – Physical Mesomechanics*, 2009, Vol. 12, No. 5, P. 65–72.

12. Trusov P.V., Volegov P.S. Crystal plasticity theory: application to the description of hardening in polycrystals [Fizicheskie teorii plastichnosti: prilozhenie k opisaniyu uprochneniya v polikristallah]. *Vestnik Tambovskogo universiteta. Estestvennye i tekhnicheskie nauki – Bulletin of the Tambov University. Natural and Technical Sciences*, 2010, Vol. 15, No. 3, Part 1, P. 983–984.

13. Trusov P.V., Volegov P.S., Yanz A.Yu. Asymmetric crystal plasticity theory to describe the polycrystal's microstructure evolution [Nesimmetrichnaya fizicheskaya teoriya plastichnosti dlya opisaniya ehvolyutsii mikrostruktury polikristalla]. *Fizicheskaya mezomehanika – Physical Mesomechanics*, 2011, Vol. 14, No. 1, P. 19–31.

14. Trusov P.V., Volegov P.S., Yanz A.Yu. Description of intergrain and grain boundary hardening of mono- and polycrystals [Opisanie vnutrizerennogo i zernogranichnogo uprochneniya mono- i polikristallov]. *Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPbGPU. Fiziko-matematicheskie nauki – Scientific and technical statements SPbSPU. Physics and mathematics*, 2010, No. 2(98), P. 110–119.

15. Alankar A., Mastorakos I. N., Field D.P. A dislocation-density-based 3D crystal plasticity model for pure aluminum. *Acta Materialia*., 2009, Vol. 57, P. 5936–5946.

16. Asaro R.J. Micromechanics of crystals and polycrystals. *Advances in Applied Mechanics*, 1983, Vol. 23, P. 1–115.

17. Ashby M.F. The deformation of plastically non-homogeneous materials. *Phil. Mag*, 1970, Vol. 21, P. 399–424.

18. Balasubramanian S., Anand L. Elasto-viscoplastic constitutive equations for polycrystalline fcc materials at low homologous temperatures. *J. Mech. and Phys. Solids*, 2002, Vol. 50, P. 101–126.

19. Bittencourt E., Needleman A., Gurtin M.E., Van der Giessen E. A comparison of nonlocal continuum and discrete dislocation plasticity predictions. *J. Mech. Phys. Solids*, 2003, Vol. 51, P. 281–310.

20. Cailletaud G., Diard O., Feyel F., Forest S. Computational crystal plasticity: from single crystal to homogenized polycrystal . *Technische Mechanik*, 2003, Band 23. Heft 2–4, P. 130–145.

21. Cermelli P., Gurtin M.E. On the characterization of geometrically necessary dislocations in finite plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 2001, Vol. 49, P. 1539–1568.

22. Cosserat E., Cosserat F. Theorie des corps deformables, Paris: A. Hermann et fils, 1909, 226 p.

23. Diard O., Leclercq S., Rousselier G., Cailletaud G. Evaluation of finite element based analysis of 3D multicrystalline aggregates plasticity. Application to crystal plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries. *Int. J. of Plasticity*, 2005, Vol. 21, P. 691–722.

24. Evers L.P., Parks D.M., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. Crystal plasticity model with enhanced hardening by geometrically necessary dislocation accumulation. *J. Mech. and Phys. Solids*, 2002, Vol. 50, P. 2403–2424.

25. Fajoui J., Gloaguen D., Courant B., Guillén R. Micromechanical modelling of the elastoplastic behavior of metallic material under strain-path changes. *Comput. Mech*, 2009, Vol. 44, P. 285–296.

26. Fleck N.A., Hutchinson J.W. Strain gradient plasticity. *Adv. Appl. Mech*, 1997, Vol. 33, P. 295–362.

27. Follansbee P.S., Kocks U.F. A constitutive description of copper based on the use of the mechanical threshold stress as an Internal State Variable. *Acta Metall*, 1988, Vol. 36, P. 81–93.

28. Forest S. Modeling slip, kink and shear banding in classical and generalized single crystal plasticity. *Acta mater,* 1998, Vol. 46, No. 9, P. 3265–3281.

29. Forest S., Barbe F., Cailletaud G. Cosserat modelling of size effects in the mechanical behaviourof polycrystals and multi-phase materials. *Int. J. Solids Struct,* 2000, Vol. 37, P. 7105–7126.

30. Franciosi P. The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metall,* 1985. Vol. 33, P. 1601–1612.

31. Franciosi P., Berveiller M., Zaoui A. Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metall,* 1980, Vol.28, Is. 3, P. 273–283.

32. Franz G., Abed-Meraim F., Ben Zineb T. Strain localization analysis using a multiscale model. *Computational Materials Science*, 2009. Vol. 45, P. 768–773.

33. Gérard C., Bacroix B., Bornert M., Cailletaud G., Crépin J., Leclercq S. Hardening description for FCC materials under complex loading paths. *Comput. Mater. Sci,* 2009, Vol. 45, P. 751–755.

34. Gerken, J. M., Dawson P.R. A crystal plasticity model that incorporates stresses and strains due to slip gradients. *J. of the Mechanics and Physics of Solids*, 2008, Vol. 56, P. 1651–1672.

35. Gurtin M.E, Anand L. A gradient theory for single-crystal plasticity. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng,* 2007, Vol. 15, P. 263–270.

36. Gurtin M.E., Anand L. A theory of strain-gradient plasticity for isotropic, plastically irrotational materials. Part I: Small deformations. *J. Mech. Phys. Solids,* 2005, Vol. 53, P. 1624–1649.

37. Gurtin M.E., Anand L., Lele S.P. Gradient single-crystal plasticity with free energy dependent on dislocation densities. *J. Mech. Phys. Solids*, 2007, doi:10.1016/j.jmps.2007.02.006.

38. Gurtin M.E., Anand, L. A theory of strain-gradient plasticity for isotropic, plastically irrotational materials. Part II: Finite deformations. *Int. J. Plasticity*, 2005, Vol. 21, P. 2297–2318.

39. Gurtin M.E., Needleman A. Boundary conditions in small-deformation, single-crystal plasticity that account for the Burgers vector. *J. Mech. Phys. Solids,* 2005, Vol. 53, P. 1–31.

40. Gurtin M.E. A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations. *J. Mech. Phys. Solids*, 2002, Vol. 50, P. 5–32.

41. Gurtin, M.E. A gradient theory of small-deformation isotropic plasticity that accounts for the Burgers vector and for dissipation due to plastic spin. *J. Mech. Phys. Solids*, 2004, Vol. 52, P. 2545–2568.

42. Gurtin, M.E. On a framework for small-deformation viscoplasticity: free energy, microscopic forces, strain gradients. *Int. J. Plasticity*, 2003, Vol. 19, P. 47–90.

43. Gurtin, M.E. On the plasticity of single crystals: free energy, microscopic forces, plastic strain gradients. *J. Mech. Phys. Solids*, 2000, Vol. 48, P. 989–1036.

44. Gurtin, M.E. The Burgers vector and the flow of screw and edge dislocations in finite-deformation single crystal plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 2006, Vol. 54, P. 1882–1898.

45. Harder J. FEM-simulation of the hardening behavior of FCC single crystals. *Acta Mechanica,* 2001, Vol. 150, P. 197–217.

46. Kalidindi S.R. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models. *J. Mech. Phys. Solids*, 1998, Vol. 46, No. 2, P. 267–290.

47. Kalidindi S.R. Modeling anisotropic strain hardening and deformation textures in low stacking fault energy fcc metals. *Int. J. Plasticity*, 2001, Vol. 17, P. 837–860.

48. Kalidindi S.R., Bronkhorst C.A., Anand L. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals. *J. Mech. Phys. Solids*, 1992, Vol. 40, No. 3, P. 537–569.

49. Kim H.-K., Oh S.-I. Finite element analysis of grain-by-grain deformation by crystal plasticity with couple stress. *Int. J. Plasticity*, 2003, Vol. 19, P. 1245–1270.

50. Kocks U.F. The relation between polycrystal deformation and single crystal deformation. *Metal. Trans.,* 1970, Vol. 1, No. 5, P. 1121–1143.

51. Kok S., Beaudoin A.J., Tortorelli D.A. A polycrystal plasticity model based on the mechanical threshold. *Int. J. Plasticity*, 2002, Vol. 18, P. 715–741.

52. Kratochvil J. A theory of non-proportional cyclic plasticity based on micromechanical approach. Proc. of IMMM-93. Int. Sem. On Microstruct. And Mech. Properties of New Enineering Mater, Mie Academic Press, 1993, P. 89–94.

53. Lele S.P. On a class of strain gradient plasticity theories: formulation and numerical implementation. *Thesis PhD. Massachusetts Inst. of Technology*, 2008, 251 p.

54. Ma A., Roters F., Raabe D. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations. *Acta Materialia*, 2006, Vol. 54, P. 2169–2179.

55. Ma A., Roters F., Raabe D. A dislocation density based constitutive law for BCC materials in crystal plasticity FEM. *Computational Materials Science*, 2007, Vol. 39, P. 91–95.

56. Ma A., Roters F., Raabe D. On the consideration of interactions between dislocations and grain boundaries in crystal plasticity finite element modeling – Theory, experiments, and simulations. *Acta Materialia*, 2006, Vol. 54, P. 2181–2194.

57. Ma A., Roters F.A. A constitutive model for fcc single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminium single crystals. *Acta Materialia*, 2004, Vol. 52, P. 3603–3612.

58. Mahesh S., Tome C.N., McCabe R.J., Kaschner G.C., Beyerlein I.J. and Misra A. Application of a substructure-based hardening model to copper under loading path changes. *Metallurgical and Mater. Trans. A,* 2004, Vol. 35A, P. 3763–3774.

59. McDowell D.L. Viscoplasticity of heterogeneous metallic materials. *Mater. Sci. Eng. R,* 2008, Vol. 62, P. 67–123.

60. Méric L., Cailletaud G., Gaspérini M. F.E. calculations of copper bicrystal specimens submitted to tension-compression tests . *Acta Metall,* 1994, Vol. 42, Is. 3, P. 921–935.

61. Mindlin R.D. Second gradient of strain and surface-tension in linear elasticity . *Int. J. of Solids and Structures,* Vol. 1, Is. 4, P. 417–438.

62. Needleman A., Asaro R.J., Lemonds J., Peirce D. Finite element analysis of crystalline solids. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng,* 1985, Vol. 52, P. 689–708.

63. Nicola L., Van der Giessen E., Gurtin M. E. Effect of defect energy on strain-gradient predictions of confined single-crystal plasticity. *J. Mech. Physics Solids,* 2005, Vol. 53, P. 1280–1294.

64. Nye J.F. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Metall.*, 1953, Vol. 1, P. 153–162.

65. Peeters B., Seefeldt M., Teodosiu C., Van Houtte P., Aernoudt E. Work hardening–softening behaviour of b.c.c polycrystalls during changing strain paths: I. An integrated model based on substructure and texture evolution, and its prediction of the stress–stpain of an IF steel during two–stage strain paths. *Acta Mater,* 2001, Vol. 49, P. 1607–1619.

66. Peeters B., Bacroix B., Teodosiu C., Van Houtte P., Aernoudt E. Work hardening–softening behaviour of b.c.c polycrystalls during changing strain paths: II. TEM observations of dislocation sheets in an IF steel during two–stage strain paths and their representation in terms of dislocation densities. *Acta Mater,* 2001, Vol. 49, P. 1621–1632.

67. Pipard J.-M., Nicaise N., Berbenni S., Bouaziz O., Berveiller M. A new mean field micromechanical approach to capture grain size effects. *Comput. мater. sci,* 2009, Vol. 45, P. 604–610.

68. Rousselier G., Leclercq S. A simplified ‘‘polycrystalline’’ model for viscoplastic and damage finite element analyses. *Int. J. Plasticity*, 2006, Vol. 22, P. 685–712.

69. Sauzay M. Analytical modelling of intragranular backstresses due to deformation induced dislocation microstructures. *Int. J. Plasticity*, 2008, Vol. 24, P.727–745.

70. Shiekhelsouk M.N., Favier V., Inal K., Cherkaou M. Modelling the behaviour of polycrystalline austenitic steel with twinning-induced plasticity effect. *Int. J. Plast*, 2009, Vol. 25, P. 105–133.

71. Shu J. Y., Fleck N. A. Strain gradient crystal plasticity: size-dependent deformation of bicrystals. *J. Mech. and Phys. Solids,* 1999, Vol. 47, P. 297–324.

72. Steck E. A., Harder J. Finite element simulation of local plastic flow in polycrystals. IVTAM Symposium on Micro- and Macrostructural Aspects of Thermoplasticity. *O. T. Bruhns and E. Stein (eds.)*, 1999, P. 79–88.

73. Svendsen B. Continuum thermodynamic models for crystal plasticity including the effects of geometrically-necessary dislocations. *J. Mech. Phys. Solids*, 2002, Vol. 50, P. 1297 – 1329.

74. Svendsen B., Bargmann S. On the continuum thermodynamic rate variational formulation of models for extended crystal plasticity at large deformation. *J. of the Mechanics and Physics of Solids,* 2010, Vol. 58, Issue 9, P. 1253–1271.

75. Tinga T., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. A strain-gradient crystal plasticity framework for single crystal nickel-based superalloys. *Report National Aerospace Laboratory NLR-TP-2005-628,* Amsterdam, 2005, 35 p.

76. Trusov P.V., Volegov P.S. Internal variable constitutive relations and their application to description of hardening in single crystals . *Physical Mesomechanics,* 2010, Vol. 13, Is. 3–4, P. 152–158.

77. Viatkina E.M., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. Numerical analysis of strain path dependency in FCC metals. *Comput Mech,* 2008, Vol. 41, P. 391–405.

78. Voyiadjis G.Z., Almasri A.H. A physically based constitutive model for fcc metals with applications to dynamic hardness. *Mechanics of Materials*, 2008, Vol. 40, P. 549–563.

79. Yalcinkaya T.M., Brekelmans W.A., Geers M.G.D. Deformation patterning driven by rate dependent non-convex strain gradient plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 2011, Vol. 59, P. 1–17.

Об авторах

Трусов Петр Валентинович (Пермь, Россия) – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой математического моделирования систем и процессов Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: tpv@matmod.pstu.ac.ru).

Волегов Павел Сергеевич (Пермь, Россия) – ассистент кафедры математического моделирования систем и процессов Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: crocinc@mail.ru).

About the authors

Trusov Petr Valentinovich (Perm, Russia) – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, Perm State Technical University (614990, 29, Komsomolsky prospect, Perm, Russia, e-mail: tpv@matmod.pstu.ac.ru).

Volegov Pavel Sergeevich (Perm, Russia) – Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, Perm State Technical University (614990, 29, Komsomolsky prospect, Perm, Russia, e-mail: crocinc@mail.ru).

Получено 03.06.2011